arXiv:2305.01874v1 [cond-mat.stat-mech] 3 May 2023

张量网络消息传递

Yijia Wang, [1,2] Yuwen Ebony Zhang, [3] Feng Pan, [1] 和 Pan Zhang[1, 4, 5, *]

[1] *CAS Key Laboratory for Theoretical Physics, Institute of Theoretical Physics,Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*[2] *School of Physical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*[3] *Department of Physics and Astronomy, University College London, Gower Street, London, WC1E 6BT, UK*
[4] *School of Fundamental Physics and Mathematical Sciences,Hangzhou Institute for Advanced Study, UCAS, Hangzhou 310024, China*[5] *International Center for Theoretical Physics Asia-Pacific, Beijing/Hangzhou, China*

研究相互作用系统时，计算其统计性质是物理学、应用数学和机器学习等多个领域的一项基础问题。然而，随着系统规模增大，状态空间呈指数级增长，因此这项任务颇具挑战性。许多标准方法都存在明显缺陷。例如，消息传递算法可能不够准确，甚至会因短环而无法收敛。与此同时，张量网络方法在大型图上可能因长环而具有指数级计算复杂度。本文提出了一种称为“张量网络消息传递”的新方法。该方法结合张量网络在收缩含有许多短环的小型子图方面的优势，以及消息传递方法在全局稀疏图上的优势，从而能够计算边缘概率和相关性等局域可观测量，解决这两种方法各自的关键缺陷。当稠密局部图的树宽有限时，对于全局上类似树、局部上密集连接的系统，我们的算法能够精确求解。我们在合成图和真实世界图上开展了数值实验，计算伊辛模型和自旋玻璃的磁化强度，以展示我们的方法优于标准置信传播和近期提出的有环消息传递算法。此外，我们还讨论了该方法在网络推断问题、组合优化问题以及量子纠错中的解码问题方面的潜在应用。

考虑一个定义在图 $\mathcal{G}$ 上的统计力学问题，该图包含 n 个顶点和一组 m 条边 $\mathcal{E}$，以及遵循玻尔兹曼分布的二元构型$\mathbf{s} \in \{+1,-1\}^n$

$$P(\mathbf{s}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\mathbf{s})}, \tag{1}$$

其中 β 为逆温度，含外场 $\{\theta_i\}$ 的能量函数为 $E(\mathbf{s}) = \sum_{(ij)\in\mathcal{E}} E_{ij}(s_i, s_j) + \sum_i \theta_i(s_i)$，而 $Z = \sum_{\mathbf{s}} e^{-\beta E(\mathbf{s})}$ 为配分函数。计算系统的宏观可观测量（例如磁化强度和关联）是统计物理、应用数学和机器学习中的重要问题；这类计算也应用于推断和学习问题，其中玻尔兹曼分布自然地作为贝叶斯推断的后验分布出现；应用于纠错码解码问题，其中可利用玻尔兹曼分布的边缘分布重构信号；还应用于组合优化问题，其中解对应于零温度下玻尔兹曼分布的典型样本，此外还有许多其他应用。

局域可观测量的计算受限于庞大的计算空间，该空间会随着系统规模呈指数增长。这个问题与计算配分函数具有相同的复杂度，在数学上属于#P问题，因此一般不存在能够精确解决该问题的多项式算法。人们已经提出了许多方法，包括马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）、消息传递算法、张量网络等。MCMC [1] 是一种使用无偏样本计算可观测量的通用方法，但其精度随样本数量增长缓慢，因此在大型系统中计算成本很高。此外，对于具有复杂景观的系统，MCMC还存在自相关问题。

诸如置信传播 [2] 和调查传播 [3] 之类的消息传递算法，是统计物理学中备受推崇的方法，在低密度奇偶校验码 [4], 译码、求解随机组合优化问题 [3], 、检测大型网络中的结构和信号 [5], 等方面也发挥着重要作用。它与贝特平均场近似 [6], 密切相关，后者在统计物理学中也称为腔方法 [7, 8]。消息传递算法通常计算成本较低，但其性能高度依赖系统的拓扑结构，只有在短环较少的局部树状图上才能表现良好。人们为将消息传递算法推广到含有短环的系统 [9–17],付出了诸多努力，但迄今为止，推广的成效十分有限，只能处理图中小区域内极短的环。张量网络方法 [18, 19] 在充满短环的图上十分强大，尤其适用于晶格，特别是二维情形，因为张量收缩可以高效消除各种大小的短环 [20]。然而，对于不具备平移不变性的系统，由于计算复杂度会随着

系统规模的增大而迅速增长，张量网络仅适用于小型系统。

在本文中，我们提出张量网络消息传递（TNMP）方法，将张量网络收缩短环的优势与消息传递迭代长环的优势相结合，从而解决二者各自存在的问题。我们的方法依赖于近期在量子计算机经典模拟背景下发展起来的任意张量网络收缩方法 [20–23]，其计算复杂度取决于邻域图的树宽，而非节点数量。因此，TNMP 可以处理比现有有环消息传递方法大得多的邻域。通过在合成网络和真实世界网络上使用伊辛模型和自旋玻璃模型，我们展示了该方法相较于置信传播、马尔可夫链蒙特卡罗以及近期提出的有环消息传递算法的优越性。下文将使用图 1所示的具体示例，首先回顾消息传递和张量网络，然后介绍我们的方法。

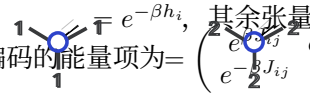
消息传递算法— 如图 1(a) 所示，在置信传播中，边缘分布 $p_i(s_i) = \sum_{\mathbf{s}\setminus s_i} P(\mathbf{s})$ 通过使用从邻居传递来的信息进行计算，其中涉及由 i 及其直接邻居组成的小型邻域子图。不失一般性地，考虑伊辛模型，其中 $E_{ij}(s_i, s_J) = -J_{ij}s_is_j$，且 $\theta_i(s_i) = -h_is_i$，其中 h_i 表示外场。于是，详细计算可写为

$$p_i(s_i) = \frac{e^{\beta h_i s_i}}{Z_i} \prod_{k\in\partial i} \sum_{s_k} e^{\beta J_{ik} s_i s_k} p_{k\to i}(s_k).$$

其中 $p_{k\to i}(s_k)$ 是腔消息，表示节点 k 取值为 s_k 时的边缘概率；将节点i 从图中移除后，可以通过来自 k的邻居、但不包括i的腔消息，以与计算边缘概率相同的方式确定。置信传播的关键假设是条件独立性，即 $p_{j\to i}(s_j)$、$p_{k\to i}(s_k)$ 和 $p_{l\to i}(s_l)$ 相互独立。只有当这些邻居之间不存在经由图中其他节点连接的路径时，这一假设才成立。然而，当图中包含许多短环时，置信传播长期以来一直面临精度不佳的问题，因为邻居被短环连接起来时（例如图1(a) 所示），条件独立性显然不成立，导致边缘概率计算不准确。

张量网络—相反，张量网络特别擅长利用张量收缩消除短环。它将配分函数 $Z = \sum_{\mathbf{s}} e^{-\beta E(\mathbf{s})}$ 的计算映射为同样形状的张量网络的收缩（例如参见 [20, 24]）。局域可观测量，例如节点 i的边缘分布，可以用相同的方式计算，例如 $p_i(s_i) = Z(s_i)/\sum_{s=\pm1} Z(s)$，其中 $Z(s_i)$ 是配分函数-

给定节点构型时的 i 为 s_i。图示见图1(b)，其中电路表示仅有两个非零元素的对角张量，即= $e^{\beta h_i}$，



$= e^{-\beta h_i}$，其余张量元素均为 0；方块表示矩阵，编码的能量项为= $\begin{pmatrix} e^{\beta J_{ij}} & e^{-\beta J_{ij}} \\ e^{-\beta J_{ij}} & e^{\beta J_{ij}} \end{pmatrix}$。从图1(b) 可以清楚地看出，计算一个节点的边缘概率涉及图中的所有节点。因此，这种方法通常只适用于小型系统，因为整个张量网络的精确收缩，其计算复杂度关于图的树宽呈指数增长 [25]。对于大型图，收缩过程中甚至无法存储中间张量。为说明这一局限性，考虑一个无限 Caley 树（Bethe 格）上的具体例子，此时置信传播（BP）渐近精确。然而，由于长环无法立即收缩，任意两个张量的收缩都会产生维度更大的张量，精确张量网络收缩的空间复杂度必然无限增长。张量网络在计算局域可观测量方面的另一局限是，直接收缩整个张量网络只能得到一个局域可观测量（例如某个节点的磁化强度），因此必须针对每个节点重复整个张量网络的收缩。

张量网络消息传递（*TNMP*）——在这项工作中，我们提出将消息传递与张量网络结合起来：由张量网络收缩负责处理短环，而消息传递负责处理长环。我们通过一个示例介绍我们的方法。

所提出方法的边缘概率计算如图 1(c) 所示，其中涉及一个阴影区域 $\mathcal{N}_i$，我们将其称为 i 的邻域，用于计算边缘概率 $p_i(s_i)$。$\mathcal{N}_i$ 内部的张量（如 j、k 和 l）以及边界上的腔张量（如 a、b 和 c ）会在计算 p_i 时进行收缩。而位于 $\mathcal{N}_i$ 外部的张量（图中的灰色张量）不会对 p_i 的计算产生贡献。边界上的张量为 $\mathcal{N}_i$ 的收缩提供了环境，即张量网络中除 $\mathcal{N}_i$ 内部张量之外的所有张量的收缩结果。然而，精确计算该环境等价于对整个张量网络进行精确收缩。在本文中，我们将环境近似为所有腔张量 $p_{a\to\mathcal{N}_i}$、$p_{b\to\mathcal{N}_i}$ 和 $p_{c\to\mathcal{N}_i}$ 的张量积，这一秩一近似假设腔张量之间相互独立。如果 a、b 和 c 不与 $\mathcal{N}_i$ 外部的张量相连，则该近似是精确的；如果它们仅通过 $\mathcal{N}_i$ 外部的张量经由长环相连，则该近似效果良好。我们以迭代方式计算腔张量，类似于消息传递算法中腔消息的计算。图 1(d) 给出了一个示例， $p_{i\to\mathcal{N}_l}$

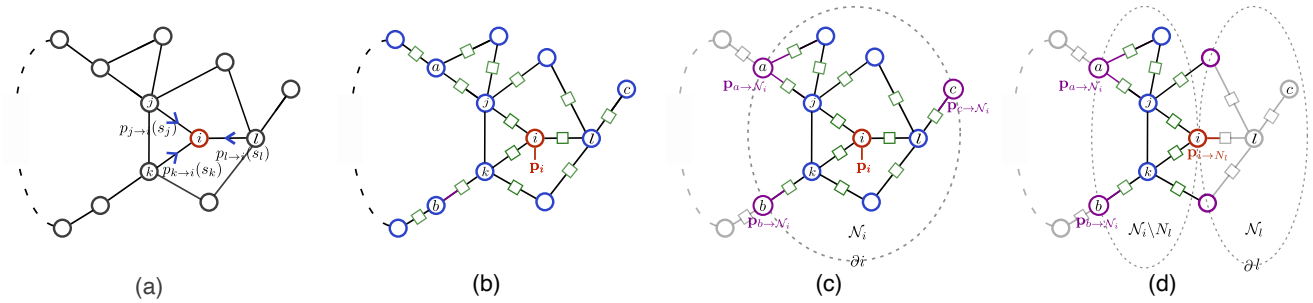


图1. 伊辛模型中，在图上计算节点 i 的边缘概率时，置信传播（BP）（a）、张量网络收缩（b）和张量网络消息传递（TNMP）（c）的示意图。在（b）、（c）和（d）中，圆形和方形表示由伊辛模型转换而来的张量。每幅图中的阴影区域表示计算 i的边缘概率时所涉及的图的部分。在置信传播中，利用其直接邻居的信息进行计算；在精确张量网络收缩中，计算涉及网络中的所有张量；而在TNMP中，则对预定义邻域 $\mathcal{N}_i$进行演化。在图（d）中，展示了TNMP中通过收缩 $\mathcal{N}_i\backslash\mathcal{N}_l$ 内部的张量和腔张量（紫色部分）来更新 $p_{i\to\mathcal{N}_l}$ 的过程。

通过对 $\mathcal{N}_i$ 中的张量进行张量收缩（排除 $\mathcal{N}_l$ 内部的张量）来计算，边界上的张量则成为腔张量。

为了确定邻域，我们提出通过逐步纳入相邻张量来生成 $\mathcal{N}_i$，同时要求边界 $\partial\mathcal{N}_i$上所有张量对（a，b）之间的最小距离 $\min_{(ab)} d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i)$ 不小于给定值 R。这里，张量 a 和 b 之间的距离$d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i)$定义为仅通过 $\mathcal{N}_i$ 之外的张量连接 a 和 b 的最短路径长度（例如，通过图1(c)和(d)中张量网络的灰色部分）。邻域生成背后的思想很直观：当从图中移除 $\mathcal{N}_i$ 时，d_{ab}越长，腔张量 a 和 b 之间的相关性就越弱。在一种特殊情况下，当张量网络是一棵树时，对于 $\mathcal{N}_i$的任意选择，边界上的张量在不经过节点 i的情况下彼此不连通，即 $d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i)=\infty$，因此我们只需利用 i的直接邻居即可生成 $\mathcal{N}_i$，此时 TNMP 就退化为置信传播。对于如图1(a)所示具有许多短环和长环的一般图，较大的最小距离会使局部变量的计算更加准确，因为边界上的腔张量具有较弱的相关性，并且生成的 $\mathcal{N}_i$ 更大，张量收缩涉及更多张量。如果 $\mathcal{N}_i$ 覆盖网络中的所有张量（即$|\mathcal{N}_i|=n$），那么 $d(\partial\mathcal{N}_i)=\infty$，边缘概率计算就是精确的，这实际上就是传统张量网络方法。从这个意义上说，我们的算法同时推广了张量网络方法和置信传播。

通过收缩邻域来计算局部变量的计算复杂度取决于邻域图的树宽。如果树宽较小，我们通过寻找良好的收缩顺序 [21, 22, 26–28]，使用精确的张量网络收缩。如果树宽较大，我们采用适用于任意张量网络 [20]的近似收缩算法。我们注意到，在计算局部期望（例如边缘分布）时（或所有变量的磁化强度），TNMP 只需收敛一次，即可得到所有一致的环境，这些环境可进一步用于通过收缩局部张量网络来计算局域可观测量。

数值实验 我们通过两个示例评估所提出的方法。第一个示例是定义在合成图上的伊辛模型，该图包含随机连边和团，如 [29] 所述。生成过程首先创建一个平均度为 d 的随机图，然后按照给定的分布抽取不同大小的团。以这种方式生成的图整体稀疏、局部稠密，因此无论对规范张量网络方法还是置信传播算法而言，都颇具挑战性。在评估中，我们随机生成了一个包含 $n=1000$ 个节点的网络，其中随机连边的 $d=2$，团的大小为 2 至 9。图 2 上方 的插图展示了该图的草图。该图经过特殊设计，借助动态切片和多 GPU 计算——这两种技术是近期在大规模量子电路模拟中发展起来的先进技术——仍可通过收缩整个张量网络计算出精确的磁化强度 M^{exact}。图 2 上方基于精确结果展示了我们的方法计算出的各节点磁化强度误差，并与 Cantwell 和 Newman 提出的近期有环消息传递方法 [16], 和马尔可夫链蒙特卡罗的误差进行了比较。图中，R X 轴上的参数控制了磁化强度计算所涉及邻域的大小。在我们的方法中，R 是邻域边界上所有张量对之间的最小距离 $\min_{(ab)} d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i)$。在 Cantwell 和 Newman 的方法中，R 是所考虑的、连接某个节点的邻居之间的路径的最大长度。

从图中可以看出，我们的方法的误差随着 R 单调下降。当 $R=0$ 时，我们的方法简化为置信传播，并得到相同的结果。当 $R=2$ 时，尽管最大邻

域大小与我们的方法的 [16] 相同，但我们的方法能得到更好的结果。随着 $R = 3$、4 和 5，差异变得更大。我们注意到，Cantwell 和 Newman 的 [16] 方法（不使用蒙特卡洛采样时）的计算成本随邻域大小（如图中所示）呈指数增长，并且会随着 R 迅速增加，因此在评估中，我们将其限制为 5。对于我们的方法，计算成本取决于邻域的树宽，而非直接取决于其大小，因此适用于较大的 R。在收缩邻域子张量网络时，我们使用精确的张量网络收缩，且 $R < 9$。对于 $R \geq 9$，邻域子张量网络非常大，因此我们使用 CATN 方法 [20] 对其进行收缩。可以看出，我们的方法适用于最大邻域大小高达 666 的情况，误差小于 10^{-7}。我们还列出了采用不同更新步数的马尔可夫链蒙特卡罗结果。每一步中， n 个自旋依次随机选出，并按照 Metropolis-Hasting 算法依次更新。可以看到，随着步数增加，误差缓慢下降；在10^{-4} 步时达到 10^{7} 。

在图 2 下方，我们使用一个自旋玻璃模型（具有随机 ± 1 耦合和随机场）在真实世界的电力网 [30]上评估我们的方法，该网络包含 $n = 494$ 个节点。对于这张图，我们获得精确的磁化强度，并评估磁化强度误差。对于所有 R 取值，TNMP 始终能够精确收缩子张量网络，即使最大的邻域包含 250 个节点也是如此。从图中可以看到，TNMP 的误差远小于置信传播、文献 [16], 中的方法以及经过大量更新步数的马尔可夫链蒙特卡罗。此外，当 R 大于 16 时，我们方法的误差降至舍入误差，表明所有环路都已纳入邻域；即使最大邻域大小小于节点数 494，TNMP 仍然是精确的。

讨论——我们介绍了结合张量网络与消息传递的 TNMP 方法。尽管我们通过统计力学模型展示了该方法，但它也能直接应用于科学不同领域的广泛问题。我们的方法可以轻松用于计算稀疏矩阵的谱和渗流问题 [16], , 也适用于真实世界网络中的推断问题和社区检测 [31, 32] , 尤其适用于整体稀疏且具有局部模体的网络。由于我们的方法并不限制实数域上的局部张量收缩，因此可以轻松将 TNMP 扩展到复数域，以计算量子系统中的期望值 [33], ；也可以使用其他类型的代数进一步扩展，例如半环中的热带代数 [34]。我们还可以将调查传播（SP）[3, 35] 与张量网络结合，用于求解约束满足问题。与置信传播类似，我们可以

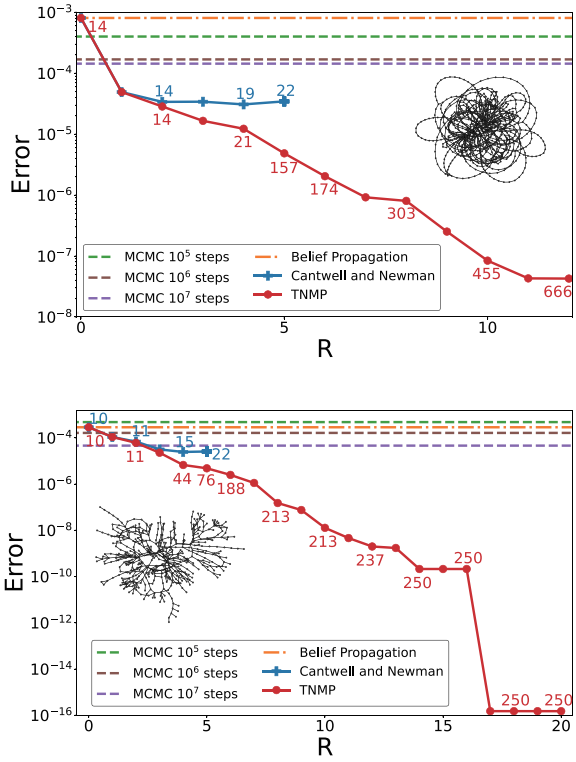


图 2.（Top）：采用不同方法得到的铁磁性伊辛模型在合成图（插图所示）上的磁化强度 $E = \frac{1}{n}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(M_i - M_i^{\text{exact}})^2}$, 的误差，该合成图使用 [29] 的模型生成。该图包含 $n = 1000$ 个节点，由一个随机图及其上的团组成。随机图的平均度为 $d = 2$，团的大小范围为 2 至 9，团的数量分别为 $[36, 12, 6, 3, 2, 1, 1, 1]$。模型的温度固定为 $T = 2.0$，外场为 $h = 0.1$。X 轴上的 R 表示在我们的方法 TNMP 中，邻域边界上所有节点对之间的最小距离（见正文）；在 Cantwell 和 Newman 的方法 [16, 17] 中，它表示所考虑的节点邻居之间路径的最大长度。图中标注的数字表示给定 R 时的最大邻居数 $\max_i |\mathcal{N}_i|$ 。（$Bottom$）：在公交电力系统 [30] 的真实世界网络上，采用不同方法得到的随机相互作用和随机场自旋玻璃模型的磁化强度误差，温度固定为 $T = 2.0$。耦合 J 以相等的概率选取为 ± 1，节点 i 的外场 h_i 服从 $h_i \sim N(0, \frac{\pi}{200})$。

—

将 SP 映射为局部张量网络收缩，并将局部收缩扩展到大型邻域。该方法将利用 SP 和一步副本对称性破缺方法，解决有环大型真实世界图上的约束可满足性问题。

另一项有趣的应用是对量子纠错码 [36] 进行译码。由于简并性，译码需要对稳定子群的所有元素求和。此外，由于稳定子的对易关系，

量子码的因子图自然包含许多短环；相比之下，经典纠错码（例如低密度奇偶校验码）可以设计得几乎不含短环。迄今为止，置信传播译码器及其变体在量子纠错码上表现不佳。我们希望，张量网络消息传递方法能够缓解表面码和量子低密度奇偶校验码中短环给消息传递译码器带来的问题。

我们的 PYTHON 算法实现及 Jupyter 笔记本教程可在 [37]我们感谢 Federico Ricci Tersenghi、Chuang Wang 和 Haijun Zhou 对稿件提出的有益讨论，也感谢 Alec Kirkley 与我们讨论并分享文献 [17]中的代码和数据。P.Z. 感谢 WIUCASICTP2022 资助以及国家自然科学基金委员会项目 11747601 和 11975294。

* panzhang@itp.ac.cn

[1] M. E. J. Newman 和 G. T. Barkema, *Monte carlo meth-ods in statistical physics*（牛津大学，纽约，1999年）。[2] J. S. Yedidia、W. T. Freeman 和 Y. Weiss, 《理解置信传播及其推广》，载于 *International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI)*（2001年）。[3] M. M´ezard、G. Parisi 和 R. Zecchina, 《随机可满足性问题的解析解与算法解》，《科学》297，812（2002年）。[4] R. Gallager, 《低密度奇偶校验码》，《IRE信息论汇刊》8，21（1962年）。[5] A. Decelle、F. Krzakala、C. Moore 和 L. Zdeborov´a, 《模块化网络随机块模型的渐近分析及其算法应用》，《物理评论 E》84，066106（2011年）。[6] H. A. Bethe, 《超晶格的统计理论》，《伦敦皇家学会会刊 A》150，552（1935 年）。[7] M. M´ezard 和 G. Parisi, 《重新审视 Bethe 格自旋玻璃》，《欧洲物理学杂志 B》20，217（2001年）。[8] M. M´ezard 和 G. Parisi, 《零温下的腔方法》，《统计物理杂志》111，1（2003年）。[9] R. Kikuchi, 《协同现象理论》，《物理评论》81，988（1951年）。[10] J. S. Yedidia、W. T. Freeman、Y. Weiss 等, 《广义置信传播》，载于 *NIPS*，第13卷（2000年），第689–695页。[11] M. Chertkov 和 V. Y. Chernyak, 《统计物理学与信息科学中的环演算》，《物理评论 E》73，065102 2006(R)（）。[12] A. Montanari 和 T. Rizzo, 《如何计算 Bethe 近似的环修正》，《统计力学杂志》P10011（2005年）。[13] A. Pelizzola, 《统计物理学与概率图模型中的簇变分法》，《物理学杂志 A：数学与通论》38，R309（2005年）。[14] G. Parisi 和 F. Slanina, 《晶格模型 Bethe-Peierls 近似的环展开》，《统计力学杂志：理论与实验》，L02003（2006年）。[15] H. Zhou 和 C. Wang, 《区域图配分函数展开与近似自由能景观：理论及若干数值结果》，《统计物理杂志》148，513（2012年）。[16] G. T. Cantwell 和 M. E. Newman, 《含环网络上的消息传递》，美国国家科学院院刊116，23398（2019年）。[17] A. Kirkley、G. T. Cantwell 和 M. E. J. Newman, 《含环网络的置信传播》，《科学进展》7，10.1126/sciadv.abf1211（2021）。[18] U. Schollw¨ock, 《矩阵乘积态时代的密度矩阵重整化群》，Annals of Physics 326，96（2011年）。[19] R. Or´us, 《张量网络实用导论：矩阵乘积态与投影纠缠对态》，Annals of Physics 349，117（2014年）。[20] F. Pan、P. Zhou、S. Li 和 P. Zhang, 《收缩任意张量网络：通用近似算法及其在图模型和量子电路模拟中的应用》，《物理评论快报》125，060503（2020年）。[21] F. Pan 和 P. Zhang, 《使用大批量张量网络方法模拟量子电路》，《物理评论快报》128，030501（2022年）。[22] F. Pan、K. Chen 和 P. Zhang, 《解决 Sycamore 量子电路的采样问题》，《物理评论快报》129，090502（2022年）。[23] X. Xu、S. Benjamin、J. Sun、X. Yuan 和 P. Zhang, 《艰巨任务：量子计算机的经典模拟》，arXiv 预印本 arXiv:2302.08880（2023年）。[24] S. Li、F. Pan、P. Zhou 和 P. Zhang, 《作为二维张量网络的玻尔兹曼机》，《物理评论 B》104，075154（2021年）。[25] I. L. Markov 和 Y. Shi, 《通过收缩张量网络模拟量子计算》，SIAM计算杂志38，963（2008年）。[26] S. Kourtis、C. Chamon、E. Mucciolo 和 A. Ruckenstein, 《利用张量网络快速计数》，《SciPost物理学》7，060 2019（）。[27] J. Gray 和 S. Kourtis, 《超优化张量网络收缩》，《Quantum》5，410（2021）。[28] G. Kalachev、P. Panteleev 和 M.-H. Yung, 《用于量子电路 XEB 验证的多张量收缩》，arXiv 预印本 arXiv:2108.05665（2021年）。[29] S. A. Williamson 和 M. Tec, 《具有局部密度和全局稀疏性的图的随机团覆盖》，载于 *Uncertainty in Artificial Intelligence* 2020 228（PMLR，）第–238页。[30] T. A. Davis 和 Y. Hu, 《佛罗里达大学稀疏矩阵集合》，《ACM数学软件汇刊》38，10 1145 2049662 2049663 2011。（）。[31] A. Decelle、F. Krzakala、C. Moore 和 L. Zdeborov´a, 《稀疏网络模块检测中的推断与相变》，《物理评论快报》107，065701（2011年）。[32] P. Zhang 和 C. Moore, 《使用消息传递实现模块度优化，可扩展地检测具有统计显著性的社区及层级结构》，美国国家科学院院刊111，18144（2014年）。[33] S. Sahu 和 B. Swingle, 《稀疏图上量子多体物理的高效张量网络模拟》，arXiv 预印本 arXiv:2206.04701（2022年）。[34] J.-G. Liu、L. Wang 和 P. Zhang, 《用于自旋玻璃基态的热带张量网络》，《物理评论快报》126，090506（2021）。

[35]A. Braunstein、M. M´ezard 和 R. Zecchina，《调查传播：一种用于可满足性的算法》，《随机结构与算法》27，201（2005年）。[36] M. A. Nielsen 和 I. Chuang，《量子计算与量子信息》（2002年）。[37] https://github.com/YijiawWang/TNMP。[38] I. L. Markov 和 Y. Shi，《通过收缩张量网络模拟量子计算》，SIAM计算杂志 38，963（2008年）。[39] G. Kalachev、P. Panteleev 和 M.-H. Yung，《用于量子电路 XEB 验证的多张量收缩》（2022年）。[40] G. Daniel、J. Gray、 *et al.*，《Opt\ ei nsum：一个用于优化类 einsum 表达式收缩顺序的 Python 软件包》，Journal of Open Source Software 3，753（2018年）。[41] J. Gray 和 G. K.-L. Chan，《具有任意几何结构的张量网络的超优化压缩收缩》，10.48550/arXiv.2206.07044（2022年）。[42] U. Schollw¨ock，《密度矩阵重整化群》在矩阵乘积态的时代，Annals of Physics **326**，96（2011年）。[43] R. Or´us，《张量网络实用入门：矩阵乘积态与投影纠缠对态》，Annals of Physics **349**，117（2014年）。[44] F. Krzakala、C. Moore、E. Mossel、J. Neeman、A. Sly、L. Zdeborov´a 和 P. Zhang，《稀疏网络聚类中的谱救赎》，美国国家科学院院刊 **110**，20935（2013年）。[45] P. Zhang，《簇状网络中渗流转变的谱估计》，Phys. Rev. E **96**，042303（2017年）。[46] E. Dominguez、A. Lage-Castellanos、R. Mulet、F. Ricci-Tersenghi 和 T. Rizzo，《二维 Edwards–Anderson模型上广义置信传播算法的特征分析与改进》，Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2011**，P12007（2011年）。

计算　　通过张量网络收缩计算边缘概率

不失一般性，考虑定义在图 $G=(\mathcal{V},\ \mathcal{E})$ 上、变量为二元变量的伊辛模型，其构型服从玻尔兹曼分布

$$P(\mathbf{s})=\frac{1}{Z}e^{-\beta[\sum_{(ij)\in\mathcal{E}}E_{ij}(s_i,s_j)+\sum_{i\in\mathcal{V}}\theta_i(s_i)]}, \tag{S1}$$

其中 $E_{ij}(s_i,\ s_J)=-J_{ij}s_is_j$和 J_{ij}为耦合常数，$\theta_i(s_i)=-h_is_i$，其中 h_i表示外场，$Z=\sum_{\mathbf{s}}e^{-\beta E(\mathbf{s})}$为配分函数。对于顶点的任意子集 $\mathcal{V}_i=\{i_1,i_2,\cdots,i_m\}\subset\{1,2,\cdots,n\}$，边缘概率 $\mathbf{s}_{\mathcal{V}_i}$ 定义为

$$\begin{aligned}P(\mathbf{s}_{\mathcal{V}_i}=x_{\mathcal{V}_i})=&\frac{1}{Z}\sum_{\mathbf{s}\backslash\mathbf{s}_{\mathcal{V}_i}}e^{-\beta[\sum_{(ij)\in\mathcal{E}}E_{ij}(s_i,s_j)+\sum_{i\in\mathcal{V}}\theta_i(s_i)]}\\=&\frac{1}{Z}\sum_{\mathbf{s}\backslash\mathbf{s}_{\mathcal{V}_i}}\prod_{(ij)\in\mathcal{E}}e^{\beta J_{ij}s_is_j}\prod_{i\in\mathcal{V}}e^{\beta h_is_i}\end{aligned} \tag{S2}$$

玻尔兹曼分布的能量函数总是易于计算，即可在多项式时间内完成。但玻尔兹曼分布的性质，例如边缘分布、关联和期望能量等可观测量，却难以求得，因为由于计算配分函数（即玻尔兹曼分布的归一化因子） Z十分困难，每种构型的显式概率值$\mathbf{s}$ 并不可知。众所周知，计算 Z 属于 #P问题，因此不存在可求解它的多项式算法。计算Z 的一种朴素方法是枚举所有可能的构型，但这种方法只适用于变量数量小于约 20 的系统。张量网络避免了对变量构型进行枚举，而是利用连接图的拓扑结构，通常能大幅降低计算成本。举个简单的例子，考虑计算含有 30 个自旋、排列成链的伊辛模型的配分函数。众所周知，可以通过从链的一端到另一端“消除变量”，轻松精确地计算该模型的配分函数，因此无需枚举所有可能的构型。实际上，这种变量消除策略可视为一种特殊的张量网络收缩算法，用于计算离散变量统计力学模型的配分函数。

原则上，任意离散变量上的分布都可以被视为有限维中的一个张量。例如， $P(\mathbf{s})$ 是一个“概率向量” $\mathcal{P}$，其维度为 2^n，可以重塑为一个具有 n 个轴的“概率张量”，其维度为 $2\times2\times2\times\cdots\times2$。未归一化版本 $e^{-\beta[\sum_{(ij)\in\mathcal{E}}E_{ij}(s_i,s_j)+\sum_{i\in\mathcal{V}}\theta_i(s_i)]}$ 可以被视为$\underbrace{\tilde{\ }\qquad\qquad\qquad

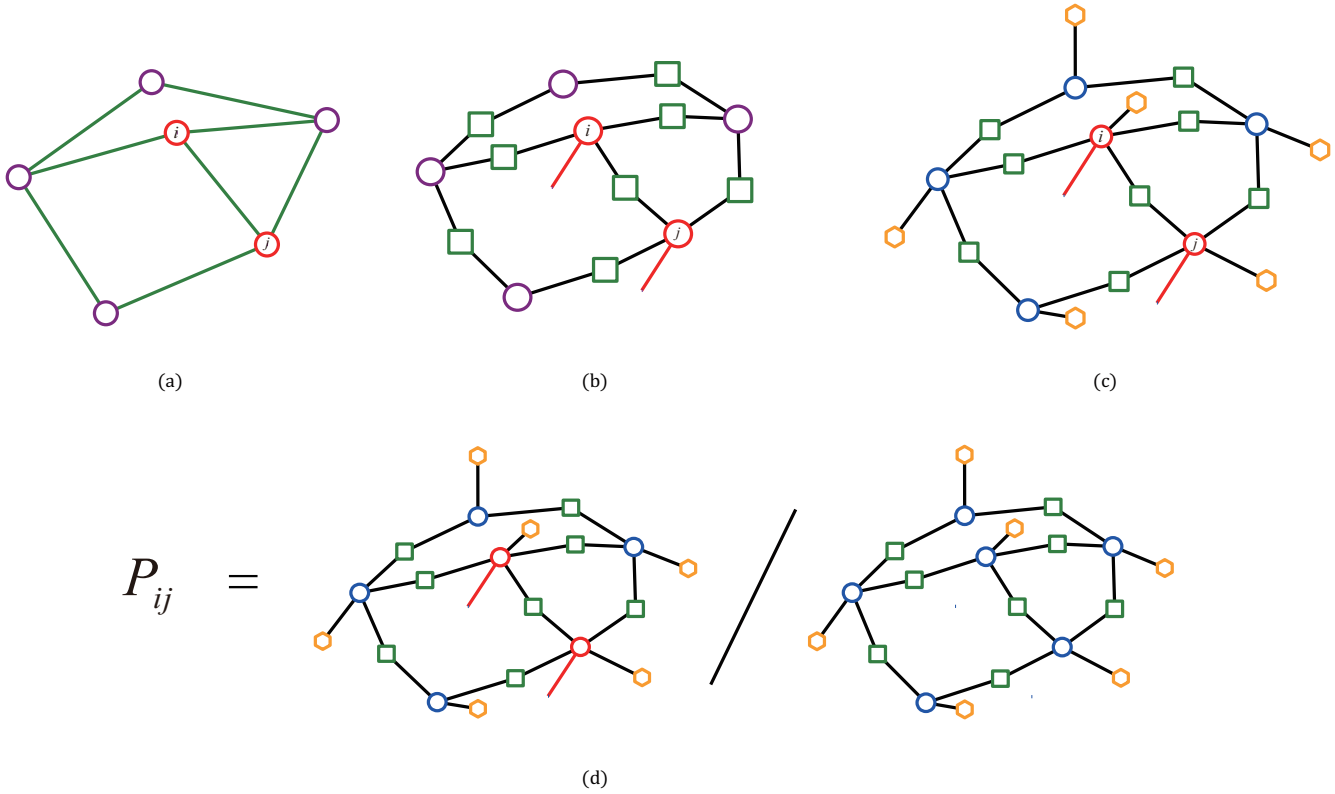


图 S1. 伊辛模型中的边缘概率向张量网络的映射。(a) 定义模型的原始图 G。(b) 未归一化分子 $Z(s_i,\ s_j)$ 的张量网络对应关系，其中紫色圆圈表示 F^i，绿色方块表示 B^{ij}，而 $i,\ j$ 上的两条红色边是结果张量的开放指标。(c) T 的另一种形式，其中 (b) 中的每个 F^i 都表示为一个复制张量（用蓝色圆圈表示），其上附有一个向量 f^i（用橙色六边形表示）。(d) $P(s_i,\ s_j)$ 的张量网络表示，它是 $Z(s_i,\ s_j)$ 的张量网络与 Z 的张量网络之商。

~高效地利用以下事实： $\mathcal{P}$ 可以表示为一个张量网络，由对应于各变量的对角“场张量”和对应于每条边上相互作用的玻尔兹曼矩阵组成。具有相互作用 J_{ij} 的边 (ij) 上的玻尔兹曼矩阵构造如下：

$$B^{ij} = \begin{pmatrix} e^{\beta J_{ij}} & e^{-\beta J_{ij}} \\ e^{-\beta J_{ij}} & e^{\beta J_{ij}}, \end{pmatrix} \tag{S3}$$

且每个变量在外场 h_i 下的场张量写作

$$F^i_{i_1,i_2,\cdots i_d} = \begin{cases} e^{\beta h_i} & i_1 = i_2 = \cdots = i_d = 1 \\ e^{-\beta h_i} & i_1 = i_2 = \cdots = i_d = 2 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{S4}$$

其中， d 是顶点 i 的度。

在这种构造下，可以通过收缩一个张量网络来计算配分函数。该网络的连接图与伊辛模型底层的连接图完全相同，其中变量替换为场张量，边替换为 Botzmann 矩阵。对于相同的构造，式 S2 中边缘分布的归一化因子 $Z(x_{\mathcal{V}_i})$，可以通过收缩由 B^{ij} 和 F^i 组成的张量网络 T 来计算。如图 S1(b) 所示，举例而言，T 与图 G 具有相同的拓扑结构—— G 中的边（$i,\ j$）对应于 T 中的 B^{ij}，而顶点 i 对应于 F^i；后者还可以进一步表示为一个复制张量，其一条腿与图 S1(c) 中的向量 $f^i = (e^{\beta h_i},\ e^{-\beta h_i})$ 共享。特别地，当 $\mathcal{V}_i$ 为空集时， $Z(x_{\mathcal{V}_i})$ 就简化为配分函数 Z；因此，我们可以通过对图 S1(d) 所示的两个张量网络取商，得到归一化后的边缘分布。

TNMP 方程

要精确求得节点 i 的单节点边缘分布 $P_i(s_i)$，我们需要收缩整个张量网络 T。如果只需要对边缘分布进行近似估计，通常不必收缩张量网络中的所有张量，因为这会带来很大的计算开销。注意，距离节点 i 越近的张量，通常对边缘分布的贡献越大。（如图 S2(a) 所示，张量网络 T 被分为两部分： i 的邻域（记为 $\mathcal{N}_i$）及其补集——环境（记为 E_i）。）因此，一种朴素的边缘分布计算方法是忽略远离节点 i 的张量，只考虑围绕 i 的张量的收缩，也就是 i 的邻域。这种方法将边缘分布的全局计算转化为局部计算，从而大幅降低计算复杂度。然而，由于它完全忽略了 E_i 中的张量，除非 $\mathcal{N}_i$ 的规模足够大，使得 E_i 对 $\mathcal{N}_i$ 而言成为一个不敏感的边界条件，否则计算结果并不精确。一种更巧妙的方法是对 E_i 进行有效近似，而不是将其完全忽略。作为对消息传递算法中近似方法的推广，我们假设 E_i 由若干互不连通的子网络组成，其中每个子网络仅与 $\mathcal{N}_i$ 边界上的一个张量相连，如图 S2(b) 所示。换言之，假设环境张量可以分解为若干较小张量的张量积。如果实际网络符合这一假设（例如，图中绿色、黄色和粉色矩形表示来自三个不同“方向”的独立环境张量），那么环境张量的分解就是精确的。否则，这只是对环境张量的张量积近似，例如图中的灰色矩形所示，

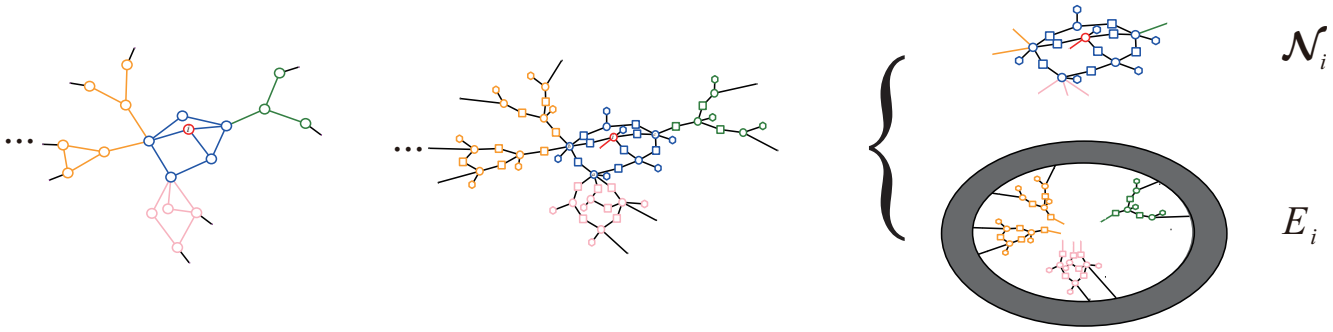
$$E_i \approx E_{i,a} \otimes E_{i,b} \otimes E_{i,c}.$$

显然，子网络之间的连接越少（且越弱），连接越长，张量积近似就越准确。

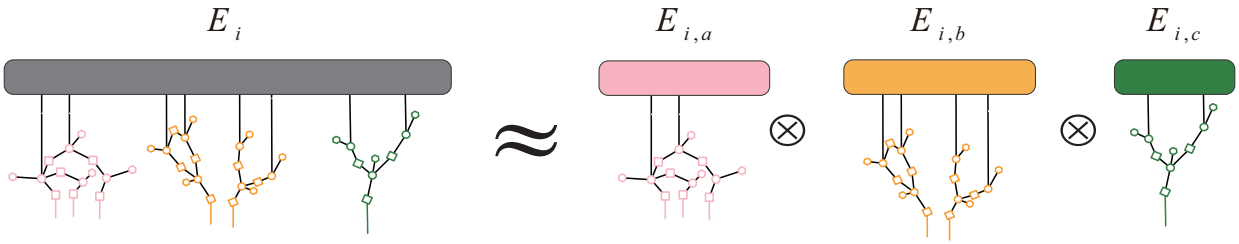
采用张量积近似，我们可以将环境收缩到 $\mathcal{N}_i$ 的边界张量中，这样，图 $P_i(s_i)$ 中的 S2 计算就转化为对图 $\mathcal{N}_i$ 所示的局部张量网络进行收缩，如图 S3(a) 所示，所有环境信息都包含在边界张量中 a， b 以及 c。

尽管整个张量网络被划分为局部子网络，但收缩子网络仍然计算量很大，例如图中的 a、 b 和 c。按照消息传递算法的思路，我们将腔张量视为函数，通过迭代算法确定腔张量，并以此迭代计算这些子网络。与边缘分布的计算类似，我们首先假设，从 $E_{i,a}$ 中移除 $\mathcal{N}_a$ 后得到的剩余网络（如图 S2(b) 和图 S3(b) 中的粉色矩形所示）也可以分解为若干个互不相连的子子网络，每个子子网络都包含在 $\mathcal{N}_a$ 的一个边界张量中，例如图 S3(b) 中的 g 和 h。如图 S3(b) 所示，我们对 g 和 h 作出相同的近似，于是 $E_{i,a}$ 被近似为腔张量 $p_{a\to\mathcal{N}_i}$；该腔张量由局部张量网络 $\mathcal{N}_a\backslash\mathcal{N}_i$ 与边界上的腔张量 $p_{\mathrm{g}\to\mathcal{N}_a}$ 和 $p_{h\to\mathcal{N}_a}$ 收缩得到。

如果每个邻域 $\mathcal{N}_i$ 都具有符合分解假设的环境（这意味着，每个边界张量的邻域之间彼此不连通，除非经过 $\mathcal{N}_i$ 中的张量），我们就可以从整个网络的边界开始，逐层收缩腔网络，直至 $\mathcal{N}_i$，此时得到的结果恰好就是 P_i。否则，当腔网络与其他网络共享连接时，整个网络将不存在边界。如果我们将腔张量之间的依赖关系视为张量之间传递的一种消息流，那么在这种网络结构下，该消息流将形成一个闭环，因此我们需要使用迭代算法来确定腔张量。由于 P_i 仅取决于结果向量中两个元素的比值（当相关张量乘以任意常数时，这一性质仍然成立），因此，只要掌握腔张量之间的关系，就能完全确定计算 P_i 所需的全部信息。因此，我们可以建立一组关于腔张量的迭代方程，并通过迭代这些方程获得它们的近似值。在这里所研究的统计力学问题和图模型中，张量网络包含大量复制张量，因此我们可以利用复制张量的性质，简化腔张量的表示。具体而言，考虑一个张量 $\mathcal{A}_{i_1,i_2,\cdots,i_m}$ 与一个复制张量 $\mathcal{I}^{i_1,\cdots,j_1}\cdot{}_{j_n}{}^{i_m}{}_{,,}$ 进行收缩，得到一个张量 $\mathcal{B}_{j_1,\cdot,j_n}$。我们可以证明，所得张量可以重写为一个向量与一个复制张量的收缩形式，其中



(a)



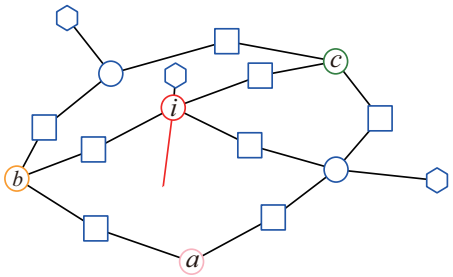
(b)

图 S2. 邻域-环境划分以及环境的张量积近似。(a) 红色顶点 i的局部子图、对应于 $P_i(s_i)$的局部张量网络及其分解，其中 E_i 中的灰色圆圈表示通过收缩我们关注范围之外的整个剩余张量网络所获得的张量。(b) 环境的直积近似，其中$E_{i,a}$, $E_{i,b}$ 和$E_{i,c}$ 表示在假设的理想条件下，从构成整个环境的三个互不连通的子网络中收缩得到的环境张量。

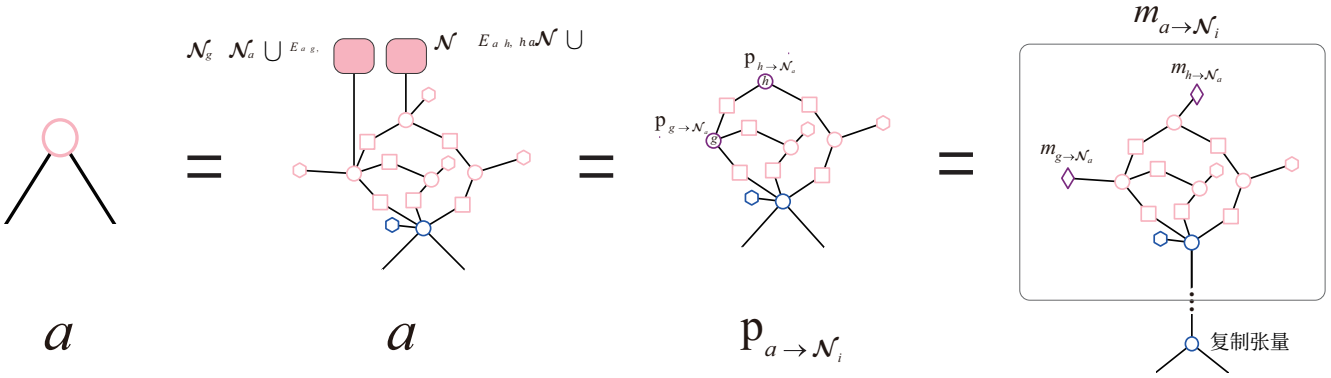
顺序 $n+1$:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{B}_{j_1,\cdot,j_n} &= \sum_{i_1,i_2,\cdots i_m} \mathcal{A}_{i_1,\cdots,i_m}\mathcal{I}^{i_1,\cdots,i_m}_{j_1,\cdot,j_n} \\
&= \sum_{i_1,i_2,\cdots i_m} \mathcal{A}_{i_1,\cdots,i_m}\Big(\prod_{k=1,\cdots,m}\delta_1^{i_k}\prod_{l=1,\cdots,n}\delta^1_{j_l} + \prod_{k=1,\cdots,m}\delta_2^{i_k}\prod_{l=1,\cdots,n}\delta^2_{j_l}\Big) \\
&= \mathcal{A}_{1,\cdots,1}\prod_{l=1,\cdots,n}\delta^1_{j_l} + \mathcal{A}_{2,\cdots,2}\prod_{l=1,\cdots,n}\delta^2_{j_l} \\
&= \sum_{q=1,2}\Big(\mathcal{A}_{1,\cdots,1}\delta^1_q\delta^q_1\prod_{l=1,\cdots,n}\delta^1_{j_l} + \mathcal{A}_{2,\cdots,2}\delta^2_q\delta^q_2\prod_{l=1,\cdots,n}\delta^2_{j_l}\Big) \\
&= \sum_{q=1,2}\Big(\mathcal{A}_{1,\cdots,1}\delta^1_q + \mathcal{A}_{2,\cdots,2}\delta^2_q\Big)\Big(\delta^q_1\prod_{l=1,\cdots,n}\delta^1_{j_l} + \delta^q_2\prod_{l=1,\cdots,n}\delta^2_{j_l}\Big) \\
&= \sum_{q=1,2}\Big[\Big(\sum_{i_1,i_2,\cdots i_m}\mathcal{A}_{i_1,\cdots,i_m}\mathcal{I}^{i_1,\cdots,i_m}_q\Big)\mathcal{I}^q_{j_1,\cdot,j_n}\Big] \\
&= (\mathcal{A}_{i_1,\cdots,i_m}\times\mathcal{I}^{i_1,\cdots,i_m}_q)\times\mathcal{I}^q_{j_1,\cdot,j_n},
\end{aligned}
\tag{S5}
$$

其中函数 $\delta^a_b = 1$ 当 $a = b$ 时成立，否则为 0。该过程如图所示。 S3(b)，其中我们看到，腔张量 $p_{a\to\mathcal{N}_i}$ 可以等价地表示为消息向量 $m_{a\to\mathcal{N}_i}$ 与复制张量的收缩。这大幅降低了消息传递过程的空间复杂度，因为我们可以使用 2 个消息向量，而不是



(a)



(b)

图 S3. 边缘概率计算中的腔体近似。(a) 在 P_i 计算中需要收缩的局部张量网络，其中张量 a、 b 和 c 是图S2(b) 中环境子网络的收缩结果，以及原始位置处的边界张量。(b) a的腔体近似，其中网络的粉色部分表示腔子网络$\mathcal{N}_a \backslash \mathcal{N}_i$，蓝色部分表示复制张量和场向量 f^a 在 $\mathcal{N}_i$、 $p_{a\to\mathcal{N}_i}$、 $p_{g\to\mathcal{N}_a}$ 和 $p_{h\to\mathcal{N}_a}$ 表示腔张量，而$m_{a\to\mathcal{N}_i}$ 表示消息向量。

在消息传递迭代过程中，而非使用腔张量。我们注意到，他的简化仅在存在多个副本或对角张量的情况下才成立（例如在统计力学问题和图模型中）。将我们的方法应用于其他问题（例如计算量子系统中的期望值）时，这种简化并不成立，因此通常需要在迭代过程中使用腔张量。

构造邻域

如果节点 $i\,\mathcal{N}_i$ 的邻域边界上的张量通过 $\mathcal{N}_i$ 外部的张量产生的关联较弱，那么在计算 i 的边缘概率时所采用的环境张量张量积假设就会更准确。在本研究中，我们通过考察连接 $\mathcal{N}_i$ 边界上张量 l 和 k 的 $\mathcal{N}_i$ 外部路径（例如 $l \to x \to y \to \cdots \to z \to k$，即 x、 y、 $\cdots$、 $z \notin \mathcal{N}_i$）来表征它们之间的关联。一个简单的观察是，路径越长，关联越弱。如果 N_i 包含张量网络中的所有张量，我们就将路径长度视为 ∞；相应地，通过收缩 $\mathcal{N}_i$ 中的张量来计算 i 的边缘概率是精确的。我们还可以通过考察耦合（例如 $\exp\,\beta(|J_{lx}|+|J_{xy}|+\cdots+|J_{zk}|)$）来更精细地测量关联。

更简单且更一般地说，在本研究中，我们只考虑路径长度，并将 $d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i)$ 定义为对应图 G 中连接腔张量 a 和 b 、且仅经过 $\mathcal{N}_i$ 之外的张量的最短路径长度，以量化 a 与 b 之间的相关性，而不考虑 $\mathcal{N}_i$内部的连接。为了确定满足弱连接条件的邻域，我们提出通过逐步生成每个顶点 i 的 $\mathcal{N}_i$

纳入 G 的相邻边，直至 $\partial\mathcal{N}_i$ 满足 $\min_{a,\ b\in\partial\mathcal{N}_i} d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i)$不小于给定值 R；随后，我们根据纳入的边构造由这些边导出的子图所对应的张量网络，记作 $\mathcal{N}_i(R)$。

更具体地说，为了从给定的图 G 中构造 $\mathcal{N}_i(R)$ 对应的子图（记作 $G_{\mathcal{N}_i}(R)$），我们首先生成 $G_{\mathcal{N}_i}(R=0)$，它仅包含 i 的直接邻居以及包含 i 的边。然后，我们通过添加 i 的任意两个直接邻居之间共享的边，生成 $G_{\mathcal{N}_i}(R=1)$。在此基础上，在 $G_{\mathcal{N}_i}(R=r-1)$ 上，我们通过迭代以下过程生成 $G_{\mathcal{N}_i}(R=r)$:

- 找到邻域的边界，即连接邻域外部节点的顶点。
- 对于边界上的所有顶点对，找出它们在 $G\backslash G_{\mathcal{N}_i}$ 中长度小于 R 的所有路径，然后将路径上的顶点和边添加到邻域中。

我们将上述过程的每次迭代称为一轮。重复此过程，直到我们从具有边界 $\partial\mathcal{N}_i$ 的 $G_{\mathcal{N}_i}(R)$ 得到 $\mathcal{N}_i(R)$，并满足 $\min_{a,b\in\partial\mathcal{N}_i} d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i) \geq R$。例如，在构建 $G_{\mathcal{N}_i}(R=0)$ 和 $G_{\mathcal{N}_i}(R=1)$ 后，我们可以依次生成 $G_{\mathcal{N}_i}(R=2)$ 和 $G_{\mathcal{N}_i}(R=3)$ 等，如图 S4 所示。图中给出了上述讨论的公交电力系统 [30] 网络中生成 $\mathcal{N}_{241}$ 的示例，其中 $R=3$。

在图 S5 中，我们比较了我们的方法（TNMP）和 Cantwell 和 Newman 的方法（C&N）在由长环和短环组成的合成网络、公交电力系统的真实网络 [30], 以及二维晶格上得到的最大邻域大小和平均邻域大小。对于 Cantwell 和 Newman 的方法，我们仅报告邻域大小不超过 20 的数值。从图中可以看出，在相同的 R下，TNMP 的邻域大小大于 Cantwell 和 Newman 的方法。这反映了 R的不同含义，以及我们的方法与 Cantwell 和 Newman 的方法对邻域的不同定义 [16]。

为了进一步展示 G中不同顶点的邻域大小分布，我们展示了公交电力系统真实世界网络上 [30] 图 S6中 TNMP 在不同 R 下给出的各邻域大小频率直方图。当 R 较大时，大小超过 200 的大邻域越来越多，这就需要一种能够高效收缩邻域张量网络的算法。

TNMP 过程的详细描述

边缘概率计算中 TNMP 算法的伪代码列于表1，其中 $G=(\mathcal{V},\ \mathcal{E})$ 表示图，J 表示耦合矩阵，h表示外场向量，$\beta=\frac{1}{T}$ 表示逆温度，而 ϵ 用于控制收敛精度。

算法1 TNMP 边缘概率计算

输入： 图 G，包含一组顶点 $\mathcal{V}$、耦合矩阵 J、外场 h、逆温度 β 和收敛判据 ϵ
输出： 每个顶点 $i\in\mathcal{V}$ 的边缘概率 $P_i(s_i)$

将每个节点转换为复制张量，将每个外场转换为向量，并将每个耦合转换为玻尔兹曼矩阵，以构成张量网络 T。
确定每个 i的邻域 $\mathcal{N}_i$。
为 $\mathcal{N}_i$ 的每个边界张量生成腔子网络 $\mathcal{C}_{a\to i}=\mathcal{N}_a\backslash\mathcal{N}_i$，该网络对应于到 $\mathcal{E}$ 的边诱导子图 $(G_{\mathcal{C}_{a\to i}})=\mathcal{E}(G_{\mathcal{N}_a})\backslash\mathcal{E}(G_{\mathcal{N}_i})$。
将每个边界-中心对的所有消息向量 $m_{a\to i}(t=0)$ 初始化为 (0.5,0.5)，消息轮次的数量迭代 t 初始化为 0。
当 差异 $=\max(|m_{a\to i}(t+1)-m_{a\to i}(t)|)>\epsilon$ **执行**
  对每个 $i\in\mathcal{V}$ **执行**
    遍历 每个边界张量 a of $\mathcal{N}_i$ **执行**
      将 $\mathcal{N}_a\backslash\mathcal{N}_i$ 与 $\mathcal{N}_a\backslash\mathcal{N}_i$ 边界上的环境张量进行收缩，得到 $m_{a\to i}(t+1)$。
    结束循环
  结束循环
  $t=t+1$
结束 while 循环
对每个 $i\in\mathcal{V}$ **执行**
  将收敛的环境张量与边界上的 $\mathcal{N}_i$ 进行收缩，得到 $P_i(s_i)$，其中收缩对象为 $\mathcal{N}_i$。
结束 for 循环
返回 $\{P_i(s_i)\}$

我们还给出一个简单的图示 计算边缘概率的完整 TNMP过程示意图

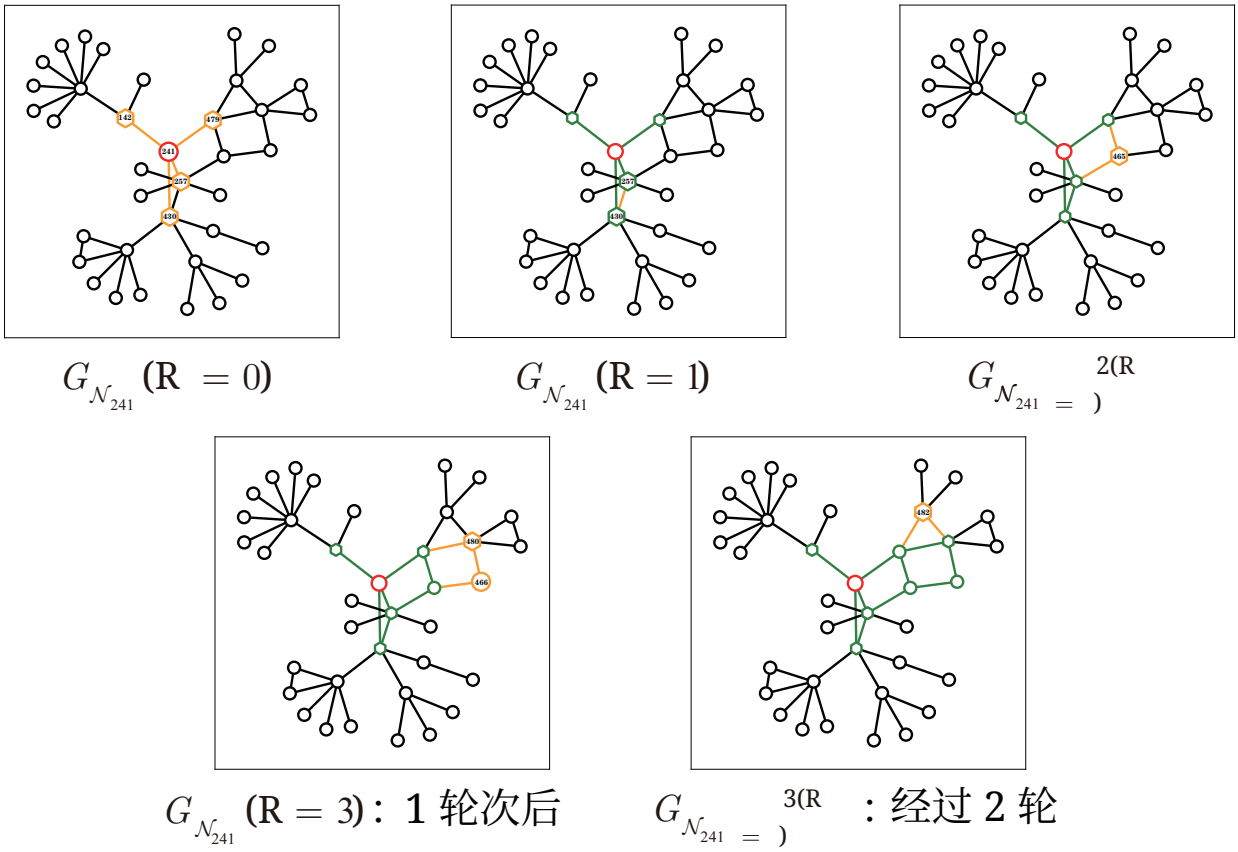


图 S4. 公交电力系统网络中，节点 241（红色圆圈）的邻域 $\mathcal{N}_i(R)$ 的生成示例， [30] for $R = 1, 2, 3$。为清晰起见，仅显示以节点 241 为中心的局部子图。彩色节点和边构成 $G_{\mathcal{N}_i}(R)$，其中橙色元素表示新添加到 $G_{\mathcal{N}_i}(R-1)$ 或前一轮次的节点和边。在这些节点中，圆点表示 $G_{\mathcal{N}_i}(R)$ 内部的节点，而六边形表示边界上的节点。 R 是邻域边界上所有张量对之间的最小距离 $\min_{(ab)} d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i)$。当 $R = 0$, $G_{\mathcal{N}_{241}}$ 仅包含 241 的直接邻居 $\{142, 430, 257, 479\}$ 以及连接它们与 241 的边时。对于 $R = 1$, $G_{\mathcal{N}_{241}}$ 需要包含每两个边界节点之间的边（长度为 1 的路径），因此必须在 $G_{\mathcal{N}_{241}}(R = 0)$ 中唯一一对相连的边界六边形之间添加边 (257,430)。当 $R = 2$ 时，我们搜索 $G_{\mathcal{N}_{241}}(R = 1)$ 中每一对边界节点之间长度不超过 2 的所有路径，结果只找到一条这样的路径 $P = 257 \to 465 \to 479$，其长度为 2，连接边界节点 257 和 479，因此 $G_{\mathcal{N}_{241}}(R = 2) = G_{\mathcal{N}_{241}}(R = 1) \cup P$。对 $G_{\mathcal{N}_{241}}(R = 3)$ 也重复类似过程：第一轮次添加路径 $P_1 = 479 \to 480 \to 466 \to 465$，第二轮次添加 $P_2 = 479 \to 482 \to 480$。经过两轮次后，我们得到一个满足条件 $\min_{a,b\in\partial\mathcal{N}_i} d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i) \geq 3$ 的邻域。

每个变量的连通性由图 G 表示，该图由四个首尾相连成环的三角形组成，如图 S7 ①所示。

可观测量计算

有了计算得到的收敛腔张量后，依赖于张量网络局部收缩的物理量便可直接计算。例如，磁化强度 M 的计算方式为

$$M = \frac{1}{|\mathcal{V}|}\sum_{i\in\mathcal{V}}[P_i(s_i = +1) - P_i(s_i = -1)], \tag{S6}$$

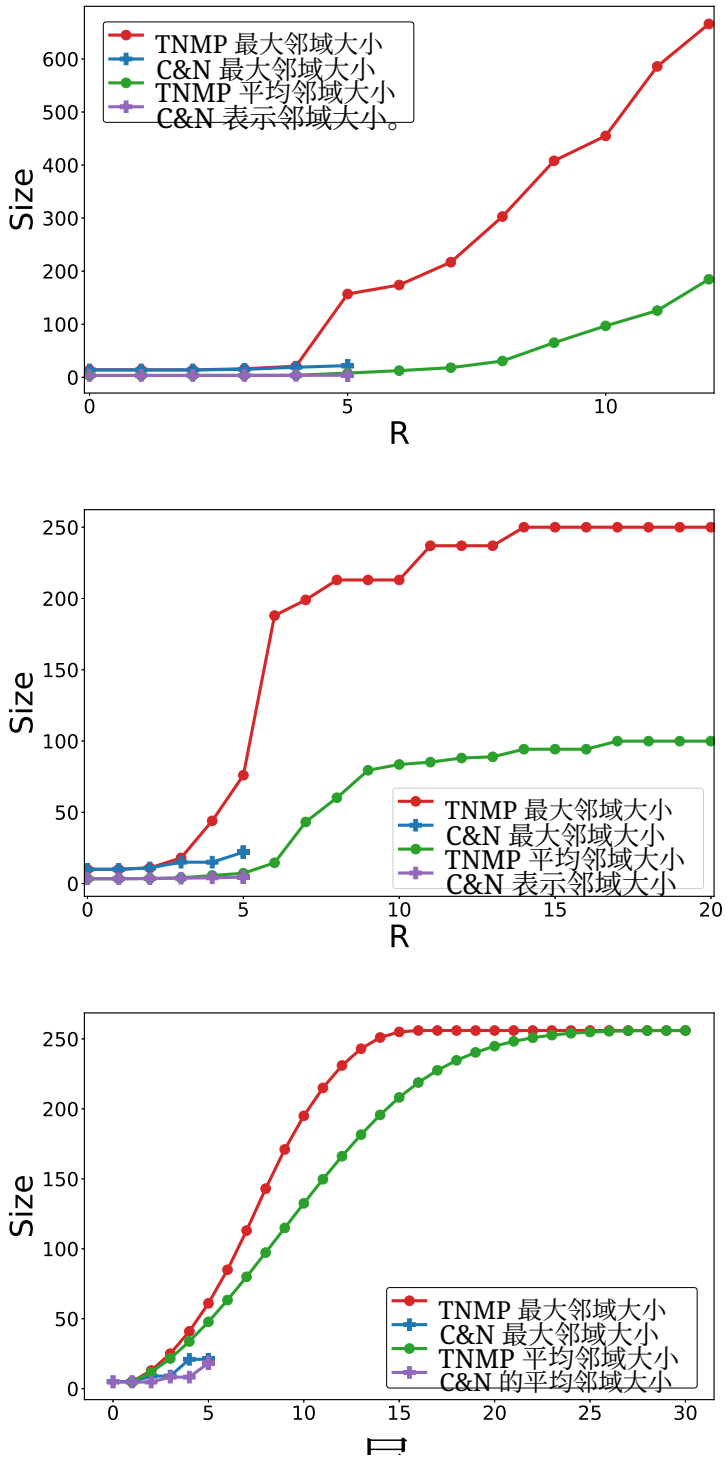


图 S5. 使用我们的 TNMP 方法和 Cantwell 和 Newman 的方法（C&N）得到的图中所有变量的最大和平均邻域大小 [16], ：（上）使用 [29]模型生成的合成图；（中）公交电力系统的真实世界网络 [30], ；（下） 16×16 方格晶格。在我们的方法中， R 是邻域边界上所有张量对之间的最小距离 $\min_{(ab)} d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i)$。在 Cantwell 和 Newman 的方法中， R 是所考虑的节点邻居之间路径的最大长度。

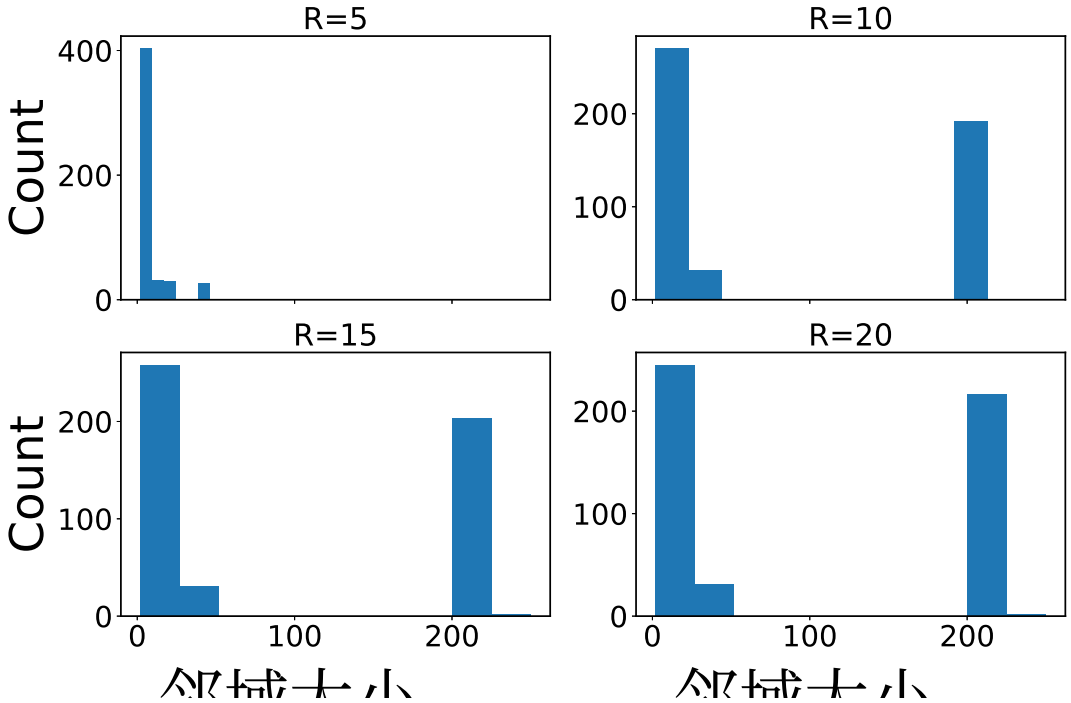


图 S6. 公交电力系统真实世界网络上，TNMP 在不同 R 值下邻域大小分布的直方图 [30]。该 $Count$ y 轴表示具有给定邻域大小的节点数量。

并且，内能 U 可以计算为

$$\begin{aligned} U &= \sum_{\mathbf{s}} P(\mathbf{s})E(\mathbf{s}) \\ &= \sum_{\mathbf{s}} P(\mathbf{s})[\sum_{(i,j)\in\mathcal{E}} -J_{ij}s_i s_j - \sum_{i\in\mathcal{V}} h_i s_i] \\ &= \sum_{(i,j)\in\mathcal{E}} [\sum_{\mathbf{s}} P(\mathbf{s})(-J_{ij}s_i s_j)] + \sum_{i\in\mathcal{V}} [\sum_{\mathbf{s}} P(\mathbf{s})(-h_i s_i)] \\ &= \sum_{(i,j)\in\mathcal{E}} [\sum_{s_i,s_j} P_{ij}(s_i,s_j)(-J_{ij}s_i s_j)] + \sum_{i\in\mathcal{V}} [\sum_{s_i} P_i(s_i)(-h_i s_i)], \end{aligned} \tag{S7}$$

其中，二点边缘概率 $P_{ij}(s_i, s_j)$ 和单点边缘概率 $P_i(s_i)$ 均可通过在边界处使用腔张量进行局部邻域张量网络收缩来高效计算。具体而言，为了得到 P_{ij}，我们首先确定一个包含两个中心 i 和 j的邻域 $\mathcal{N}_{ij}$，并按图 S1(d) 所示对 $\mathcal{N}_i$ 进行收缩，从而得到P_{ij}、$_i$；然后对 $\mathcal{N}_j$ 重复相同的收缩，得到 P_{ij}、$_j$。接着，我们通过将 P_{ij} 近似为 1 2(P_{ij}、$_i + P_{ij}$、$_j$)，并将所有 P_{ij} 代入式 S7，计算内能 U。我们还在图 S8 中给出了一个简单示例，展示如何计算图 S7 中模型的P_{k_1}、$_{k_2}$。计算二点边缘概率 $P_{ij}(s_i, s_j)$ 的另一种可能方法是，对包含 i 和 j的邻域张量网络 $\mathcal{N}_{ij}$ 以及 $\mathcal{N}_{ij}$边界处的腔张量进行收缩。

张量网络收缩的收缩顺序与切片

Contraction order and slcing

要对由大量张量组成的张量网络执行收缩，我们会维护一个张量对序列（例如 (1，2)，(2，3)，(3，4) $\cdots$，(n，$n-1$)），并且在收缩的每一步中，从中弹出一对张量

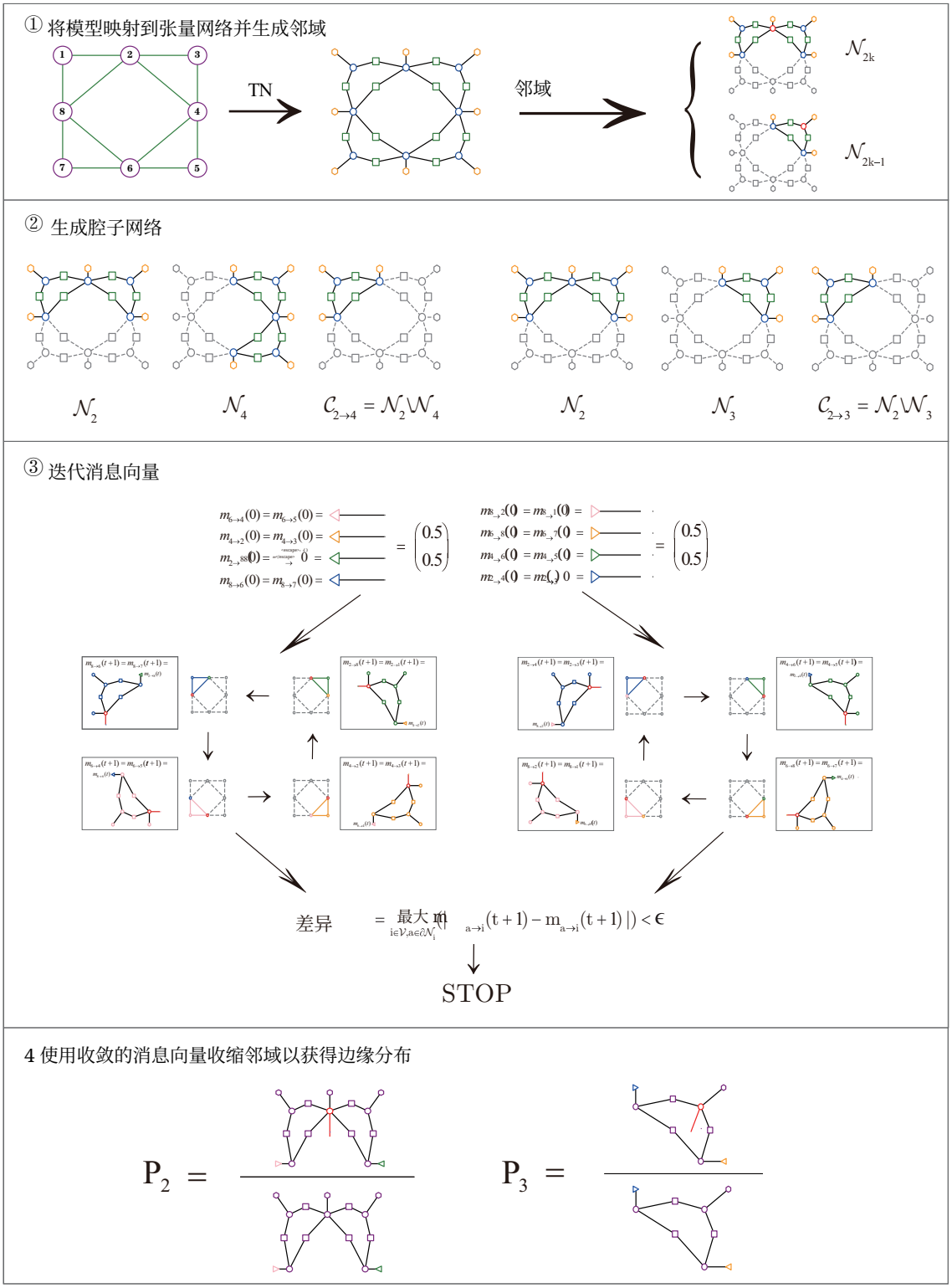


图 S7. 具有短环的玩具模型中 TNMP 边缘概率计算的详细过程。在张量网络的图示表示中，圆形表示复制张量，六边形表示场向量，方形表示玻尔兹曼矩阵，三角形表示消息向量。（不同步骤的图示中，节点的颜色可能有所不同，但它们始终表示同一个张量。）在步骤 ① 中，我们将原始图映射到相应的张量网络，并为每个顶点生成 $\mathcal{N}_i (R = 1)$。由于图对称性，仅存在两种邻域结构： $\mathcal{N}_{2k}$ 和 $\mathcal{N}_{2k-1}$，对应于 $k \in \{1, 2, 3, 4\}$；它们在图示中以彩色部分表示。在步骤 ② 中，我们通过选取仅出现在 $\mathcal{N}_i$ 中而不出现在 $\mathcal{N}_j$ 中的玻尔兹曼矩阵，构造腔子网络 $\mathcal{C}_{i\to j}$。这些矩阵、与其相连的复制张量以及相应的场向量共同构成 $\mathcal{C}_{i\to j}$。$\mathcal{C}$ 也存在两种结构，其示例同样以彩色部分表示。在步骤 ③ 中，我们通过局部张量网络收缩迭代消息向量，直至收敛。相应的子图 $G_{\mathcal{C}_{i\to j}}$ 显示为流程图循环上的彩色部分，其旁边是与 $m_{i\to j}$ 成正比的相应张量网络，其中三角形表示最后一轮迭代得到的消息向量。在步骤 ④ 中，与图 S1 类似， P_i 是 Z_i 的近似与 Z 的近似之商。张量网络表示中的三角形表示最后一轮迭代得到的收敛的消息向量。

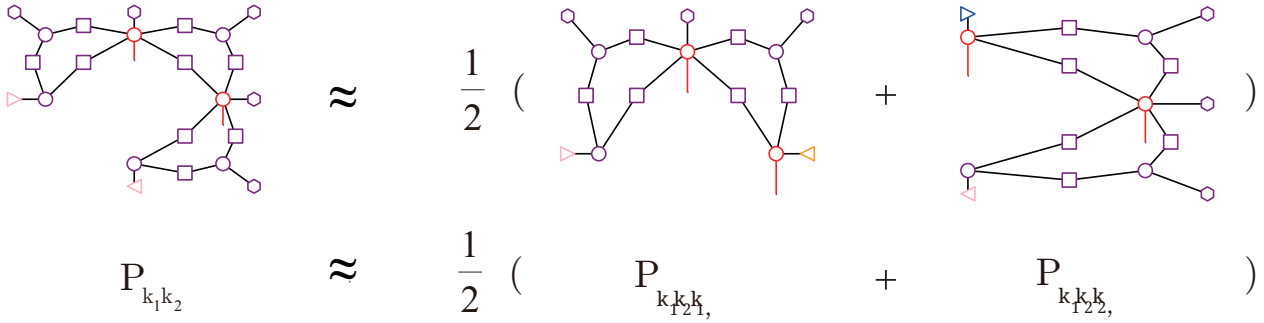


图 S8. P_{k_1}的近似计算示意图，k_2 对应图 S7中的模型。图中各元素的对应关系遵循图 S7 ④的表示。

这一序列并收缩成一个张量。这个张量对序列称为收缩顺序 π，其中所有初始张量和中间张量均只出现一次。整个收缩过程的计算成本很大程度上取决于收缩顺序。在所有可能的收缩方式中，收缩的最小成本由网络 [38], 的树宽的指数决定，该树宽定义为最优树树分解下的最大袋大小。

采用顺序 π 进行收缩的计算成本，通常用空间复杂度（$\mathbf{sc}(\pi)$）和时间复杂度 （$\mathbf{tc}(\pi)$）来表征。空间复杂度是指按照顺序 π指定的收缩过程中所有快照的维数总和的最大值，通常通过整个收缩过程中最大中间张量的维数来估算。时间复杂度是指每次张量对收缩中标量乘法次数总和的对数，这等于 π 的每个收缩步骤中所涉及指标的维数乘积。正如 [38], $\min_\pi \mathbf{sc}(\pi)$ 所示，张量网络的空间复杂度等于其对应图的树宽。因此，采用最优收缩顺序时，TNMP 的计算成本取决于对应图的树宽。

然而，确定网络的树宽以及找到能使复杂度最低的收缩顺序都是 NP难问题。人们开发了启发式算法来寻找计算复杂度较低的收缩顺序，例如采用贪心策略，选择一对张量，使收缩的输入张量维数与输出张量维数之比最大。在 [26] 中，有一种算法提出先对张量网络进行平衡划分，使割大小较小，然后分别为图的各个分区所对应的子张量网络寻找收缩顺序。一系列沿用基于平衡划分策略的研究已应用于许多问题，例如求解约束满足问题 [26] 和量子计算机模拟 [21, 27]。最近的研究表明，通过搜索缩并树（例如使用模拟退火）得到的收缩顺序质量更好 [39]。在这项工作中，我们选用了启发式算法的一个开源实现 *opt-einsum* [40]。该算法通过递归式深度优先搜索，并结合分支、贪心选择和平衡划分启发式方法，来寻找收缩顺序。我们注意到，其他用于寻找收缩顺序的算法和非公开软件包也能取得相似的性能，例如使用 [21]。

除了在 TNMP 中收缩邻域外，在数值实验中，为了通过收缩整个张量网络获得精确结果，从而衡量不同算法的误差，底层张量网络的空间复杂度（即树宽的指数）可能会超过物理设备的存储限制，因此我们使用 动态切片 方法，对过大的张量网络进行精确收缩。张量网络收缩的操作是：在给定指标取值的条件下，将每个张量的元素相乘，然后对所有可能的指标取值所对应的乘积求和。在切片方法中，会选取一些指标，显式地“手动”对其求和，而不将它们纳入张量维度，从而将一次收缩转化为多次彼此独立且更容易执行的子缩并。选定切片指标后，切片方法会固定这些指标的取值，并枚举相应指标的所有组合取值，以生成一个新的张量网络，再对其进行子缩并。随后，将这些 $2^{|\text{sliced indices}|}$ 次子缩并的结果相加，即得整个张量网络收缩的结果。在精确边缘概率计算中，我们直接调用开源实现 Cotengra [27] ，根据缩并树 的思路寻找切片指标和切片后的收缩顺序，并通过交错执行子树重配置与切片来进行搜索。

Approximate contraction, and the trade-off between the contraction error and message passing error

在我们的 TNMP 算法中，当用于计算边缘分布和腔张量的邻域及其对应的局部张量网络非常大（例如 R 很大时），收缩的空间复杂度会超过物理设备的上限，局部收缩的时间复杂度也会相当高，因此我们需要考虑近似收缩。近似收缩邻域张量网络的难点在于网络的连通性不规则，因此传统的张量重整化方法和边界矩阵乘积态方法并不适用。幸运的是，近年来已有多种任意收缩方法被提出 [20, 41]。在这项工作中，我们采用了我们当中的一些作者在 [20]提出的 CATN 方法。在 CATN 方法中，张量采用规范形式的矩阵乘积态（MPS）进行表示、压缩和收缩，这与密度矩阵重整化方法类似。借助 MPS 表示，我们可以通过降低虚拟键维数 χ 和物理键维数 D，始终将中间张量的规模控制在物理设备的限制范围内。

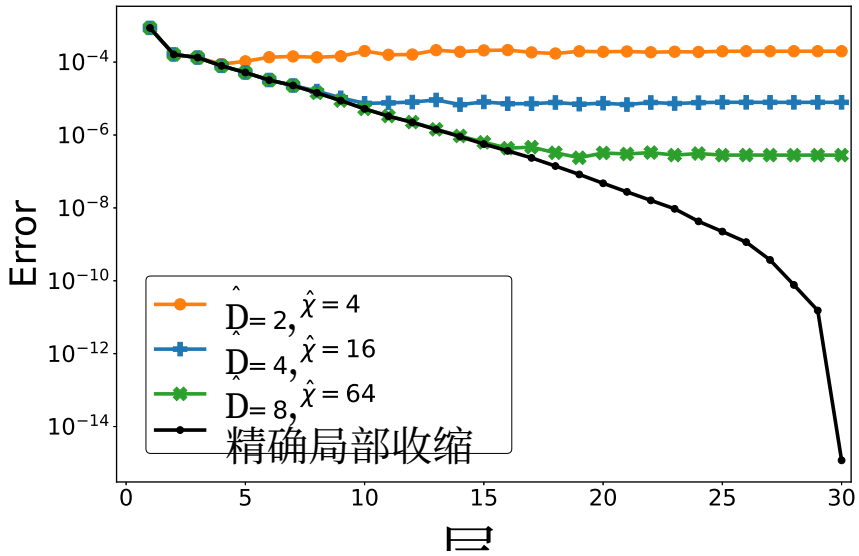
在 CATN 中，每个张量都表示为满足以下条件的标准矩阵乘积态：(1) 其键维数 D 和 χ 不大于给定参数 $\hat{}D$ 和 $\hat{}\chi$，(2) 处于规范形式，(3) 其指标经过重新排列，使待收缩的指标位于指标序列的末尾或开头，(4) 与网络中任意其他张量（同样表示为矩阵乘积态）至多共享一条边。任何张量都可以通过 QR 分解和奇异值分解 [42, 43]近似为这样的标准矩阵乘积态。更具体地说，对于标准矩阵乘积态的四项要求，(1) 可以通过奇异值分解截断实现，(2) 可以通过 QR 分解实现，(3) 和 (4) 可以通过“交换”和“合并”操作实现，其原理是将矩阵乘积态的一部分还原为原始张量，然后重新进行奇异值分解截断。

我们将上述从初始原始张量或中间通用 MPS 到标准 MPS 的近似转换称为准备；与精确的张量网络收缩类似，收缩 步骤是指对两个张量的公共指标求和。CATN 的做法是按照收缩顺序重复执行（1）准备和（2）收缩，直到网络中只剩下一个结果张量。在 CATN 中，键维数越大，MPS 就越能忠实地表示原始张量，从而得到更准确的近似和更小的误差。

如果增大待收缩的局部张量网络的规模，完成局部张量网络收缩将变得更加困难，从而导致在给定计算资源（例如，固定的 $\hat{}D$ and $\hat{}\chi$）下，CATN 方法与精确结果之间的差异增大，产生 收缩误差。然而，与此同时，规模更大的局部张量网络通常具有更大的 R 值，因此能够降低局部张量网络边界上张量之间的相关性（通过增加张量之间经由局部张量网络外部张量连接的环路长度），从而降低消息传递误差。显然，收缩误差是邻域大小的递增函数，而消息传递误差是邻域大小的递减函数。因此，邻域子图的规模在收缩误差和消息传递误差之间形成了一种权衡。由此，随着邻域大小的变化，总误差既不是单调递减函数，也不是单调递增函数，而是取决于 CATN 算法所使用的计算资源。此外，键维数和邻域大小均与计算复杂度呈正相关，其中，键维数衡量的是实现更精确的局部 CATN 所需的计算成本，而邻域大小衡量的是实现更精确的全局消息传递所需的成本。因此，在给定计算条件的恒定$\hat{}$限制下，我们可以通过调整三个参数 D、$\hat{}\chi$和R来获得更小的误差。

为说明 CATN 的收缩误差与消息传递误差之间的权衡，我们研究了所提方法在具有随机相互作用和随机场的 16×16 方格晶格自旋玻璃模型上的表现。在方格晶格中，无论如何定义节点 i的邻域，边界上任意一对节点之间的最小距离始终很小。从这个意义上说，秩一环境的质量始终不够准确，因此结果的表现完全取决于邻域的大小，并随邻域增大而单调提升。在我们的评估中，由于最小距离不会随邻域大小增加，我们通过逐层纳入节点 i 的邻居、邻居的邻居等，来确定其邻域。

如图所示，S9随着层数增加，起初，总误差几乎等于消息传递误差，而后者可以通过采用精确局部收缩得到的总误差来估计。随后，当消息传递误差降低到与 CATN 误差相当的水平时，局部收缩误差开始主导总误差，因此曲线开始偏离对应于精确局部收缩的曲线，最终达到一个平台，此时总误差随层数缓慢变化。我们将 CATN 收缩曲线与精确收缩曲线分离时达到的总误差称为临界误差。对于 CATN 的较小键维数，最终平台高于临界误差，因此通过权衡误差，



图S9。TNMP 计算平均边缘分布时的误差 $\frac{1}{n}\sqrt{\sum_i (M_i - M_i^{exact})^2}$，作为 $layers$ 数量的函数（$G_{\mathcal{N}_i}$ 定义为 $\mathcal{V} = \{v \in \mathcal{V}$ 的顶点诱导子图 $G(|d(v, \bar{i}) \leq R\})$，其中局部邻域由 CATN 采用不同的键维数 D 和 $\hat{\chi}$ 进行收缩；模型为随机相互作用随机场伊辛模型，定义在 16×16 个方格晶格上，温度固定为 $T = 2.0$。耦合 $J \sim Bernoulli(0.5) \times 2 - 1$，外场 $h \sim N(0, \frac{\pi}{200})$。

TNMP 达到的误差低于纯消息传递和全张量网络近似收缩两者。对于较大的键维数，CATN 误差始终较小，且非常接近临界误差；但在平台的最右端，由于邻域几乎覆盖整个张量网络，TNMP 可以达到与全张量网络近似收缩相同的误差水平。铁磁模型和自旋玻璃模型的磁化强度误差热图如图所示。S10

TNMP 的收敛性

为了使消息传递算法的结果保持一致，消息传递算法必须收敛，否则，算法的不同运行会产生不同的结果。然而，一般而言，无法保证消息传递算法一定会收敛。虽然它们通常在高温下收敛，但其中一些在低温下不会收敛。为了分析 TNMP 的收敛性质，我们可以将利用旧消息进行局部收缩以获得新消息的过程抽象为消息之间的更新方程，并将消息的迭代视为在平凡不动点处展开的线性系统的演化过程。随后，可以利用平凡不动点的线性稳定性分析来研究迭代过程的收敛性。从这一角度来看，线性化消息传递方程对应于偏离平凡不动点时更新方程的（广义）非回溯算子 [17, 44, 45], 线性化。利用线性系统稳定性理论，我们可以根据广义非回溯矩阵的特征值，获得 TNMP 在给定模型上的收敛特性。但在本研究中，我们不会详细研究相应的广义非回溯矩阵，以定量分析 TNMP 的收敛性和不动点。

为了研究 TNMP 的收敛特性，我们采用一个简单的论据：在 TNMP 中使用的邻域越大，边界上腔张量之间的关联就越弱，从而使 TNMP 具有更好的收敛特性。我们通过一个例子来说明这一点：在 16×16晶格上对爱德华兹-安德森伊辛自旋玻璃模型应用 TNMP。我们比较了在不同温度下，采用不同层数构建邻域（层数越多，邻域越大）时 TNMP 收敛所需的迭代步数。结果见图S11。可以看到，随着层数（以及邻域大小）增加，在相同温度下，TNMP 收敛所需的迭代次数更少；在固定迭代步数下，TNMP 则能在更低温度下收敛。换言之，邻域越大，TNMP 的收敛特性越好。与二维爱德华兹-安德森自旋

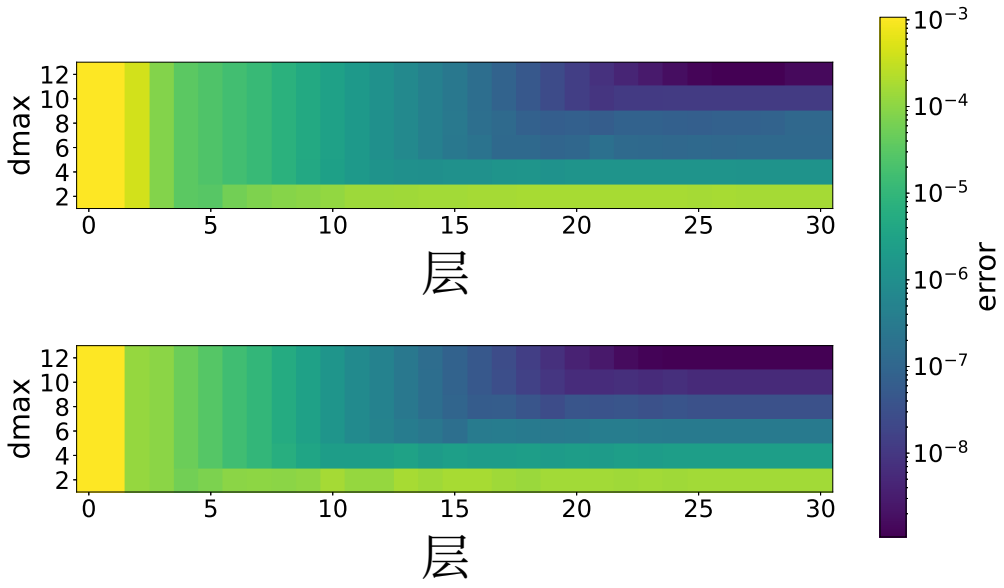


图 S10. CATN 在方格晶格上、固定温度 $T = 2.0$ 时，磁化强度 $E = \frac{1}{n}\sqrt{\sum_i (M_i - M_i^{exact})^2}$ 与最大键维数 $dmax$ 之间的误差热图，横轴为 $layer$。（上）：恒定外场下铁磁伊辛模型的结果，其中所有耦合均取 $+1$，所有外场均为 $h_i = 0.1$。（下）：随机相互作用随机场自旋玻璃模型的结果，其中每个耦合以相同概率取 $+1$ 和 -1，每个外场 h_i 服从 $h_i \sim N(0, \frac{\pi}{200})$。

自旋玻璃模型（如 [46], 中所研究的）相比，TNMP 能够在更宽的 β范围内收敛。

关于 TNMP 性能的更多结果

本节将给出 TNMP 在公交电力系统真实世界网络上的性能补充结果 [30]。在图 S12的上图中，我们绘制了磁化强度误差随 R的变化，并与 Cantwell 和 Newman 的方法及马尔可夫链蒙特卡罗结果进行比较。结果在定性上与 TNMP 在该图上的自旋玻璃模型中的表现相似。图 S12 的下图展示了使用 TNMP 得到的平均磁化强度，并与置信传播结果和精确结果进行比较。可以看到，当 $R = 5$时，TNMP 的结果与精确结果非常吻合。

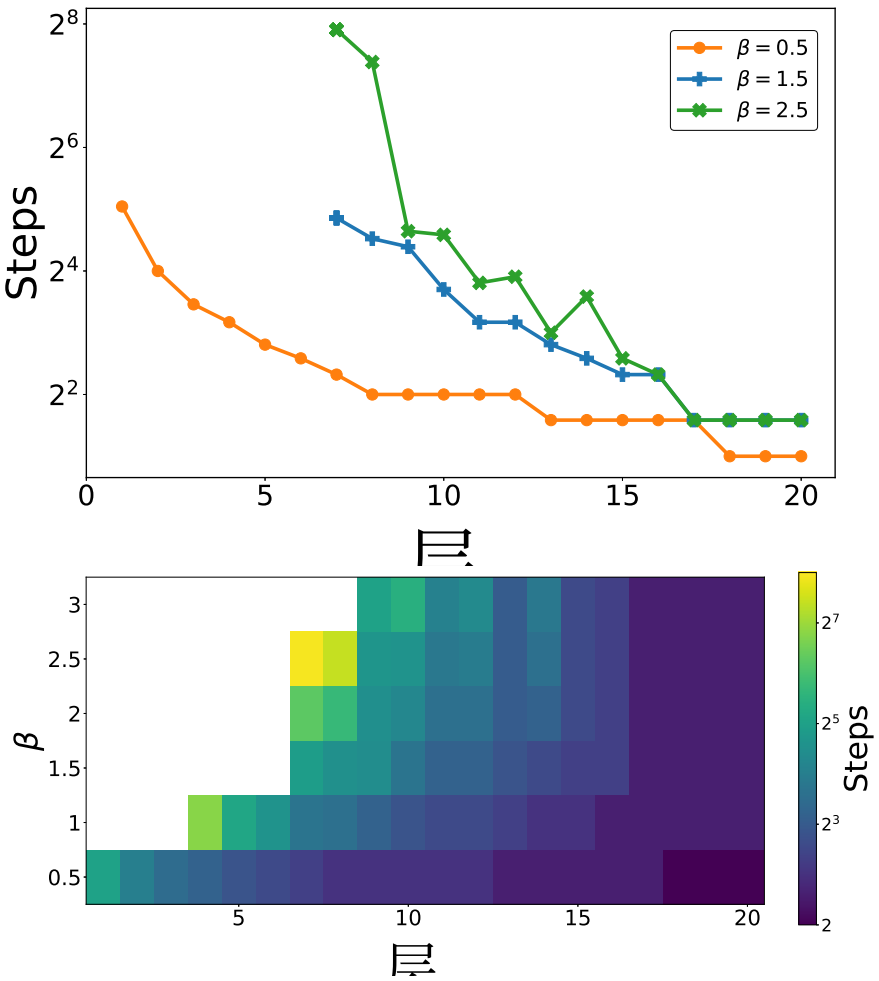


图 S11. **TNMP 收敛前的迭代次数（步数）**，展示了 TNMP 在 16×16 方格晶格上的随机相互作用随机场伊辛模型行为，其中温度为 $T = 1/\beta$，收敛判据为 $\epsilon = 10^{-6}$。每个耦合以相同概率取值 $+1$ 和 -1，每个外场 h_i 均服从均值为 0、方差为 $\pi/200$ 的高斯分布。（上）不同逆温度 β 下，收敛步数与 $layer$ 的关系（$G_{\mathcal{N}_i}$ 定义为 $\mathcal{V} = \{v \in \mathcal{V}\ (G)\ |d\ (v,\ i)\ \leq R\}$ 的顶点诱导子图）。（下）步数关于 $layer$ 和 β 的热图，其中白色区域表示在相应参数下迭代无法收敛。

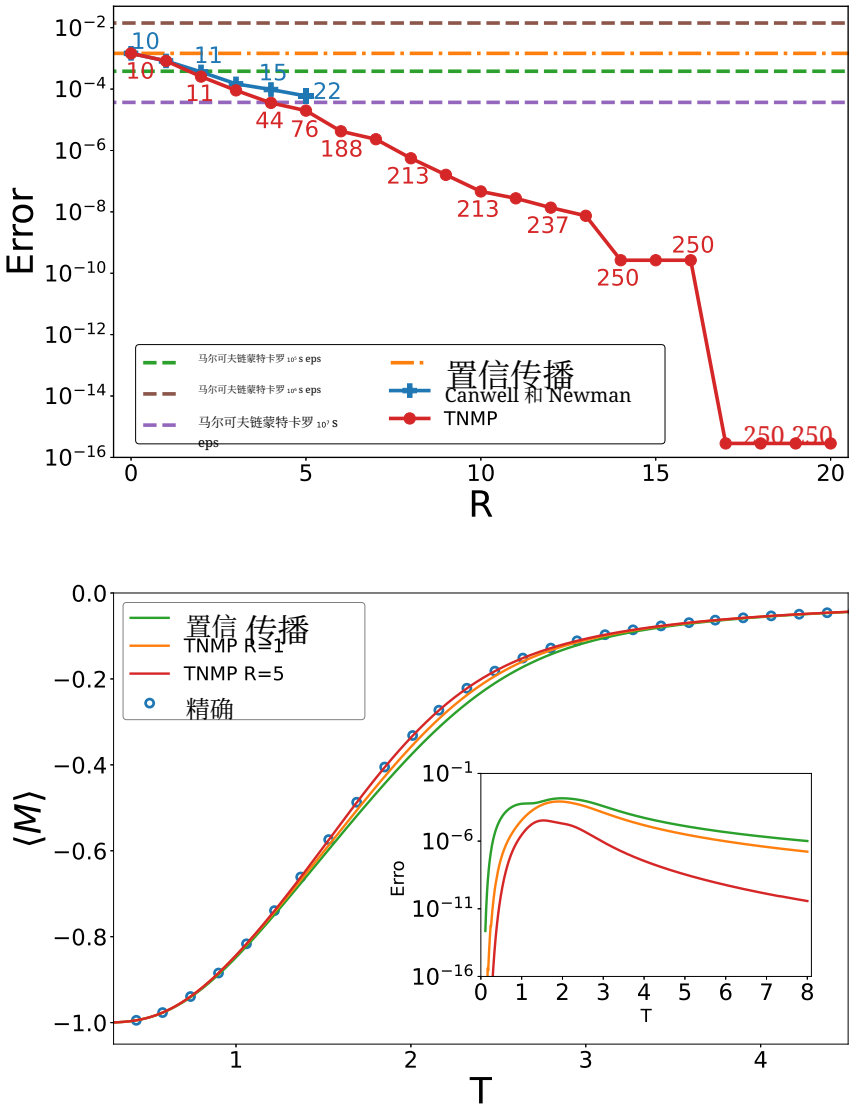


图 S12. TNMP 在真实世界公交电力系统网络 [30]上的铁磁伊辛模型中的表现。该系统为铁磁系统，具有耦合 $J_{ij} = 1$ 和外场 $h_i = 0.1$。（上）在固定温度 $T = 2.0$下，各种方法得到的磁化强度误差 $E = \frac{1}{n}\sqrt{\sum_i (M_i - M_i^{exact})^2}$ 随 R 的变化。图中标注的数字表示给定 R时的最大邻居数 $\max_i |\mathcal{N}_i|$。在我们的方法中， R 是邻域边界上所有张量对之间的最小距离 $\min_{(ab)} d_{ab}(\partial\mathcal{N}_i)$。在 Cantwell 和 Newman 的方法中， R 是所考虑的节点邻居之间路径的最大长度。（下）TNMP 在不同 R 下得到的平均磁化强度 M（当 $R = 0$时即为置信传播）随温度 $T = \frac{1}{\beta}$ 的变化。插图：TNMP 在不同温度下使用不同 R 值时得到的磁化强度误差 E。