

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
ННІ "Фізико-технічний факультет"
Кафедра фізики ядра та високих енергій імені О.І. Ахієзера

Пояснювальна записка

до дипломного проекту (роботи)

МАГІСТРА

на тему

укр. Ефективна оптимізація тривимірних тензорних мереж
з одношаровою стратегією

англ. Efficient optimization of three-dimensional tensor networks
with the single-layer strategy

Виконав: студент 2-го курсу магістратури,
групи ТЯ-61

спеціальності 105 прикладна фізика та
наноматеріали

освітня програма: Експериментальна
ядерна фізика та фізика плазми

Лукін І.В. _____
(особистий підпис)

Керівник д.ф.-м.н., ст. досл.

Сотніков А.Г. _____
(особистий підпис)

Рецензент к.ф.-м.н., с.н.с.

Пелетминський О.С. _____
(особистий підпис)

АНОТАЦІЯ

Розроблено нові тензорно-мережеві алгоритми для дослідження тривимірних сильновзаємодійних квантових систем на решітці. Методи базуються на одношаровому відображенні тензорної мережі, що дає змогу значно знизити обчислювальні витрати на згортання тривимірної тензорної мережі. Ми протестували запропонований підхід на моделі кубічної решітки Гейзенберга і отримали показове узгодження наших результатів з попередніми результатами квантового методу Монте-Карло. Запропонована обчислювальна схема є основою для доступних і точних обчислень тривимірних квантових систем за допомогою тензорних мереж, які не мають проблеми знаку і можуть бути застосовані до систем з помірними і сильними взаємодіями між частинками.

ABSTRACT

We develop new tensor network algorithms to study three-dimensional strongly interacting quantum systems on the lattice. The methods are based on the single-layer tensor network mapping, which allows us to significantly reduce the computational costs of the three-dimensional tensor network contractions. We have tested the proposed approach on the cubic-lattice Heisenberg model and observed a remarkable agreement of our results with the previous quantum Monte Carlo calculations. The proposed computational scheme opens the way for computationally affordable and precise tensor network computations of three-dimensional quantum systems, which are also sign-free and applicable to moderate and strongly interacting systems.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
Огляд літератури	8
РОЗДІЛ 1 Моделі Габбарда й ефективні моделі Гейзенберга	11
1.1 Формулювання моделі Габбарда	12
1.2 Ефективні спінові моделі	17
РОЗДІЛ 2 Тензорні мережі	20
2.1 Квантова заплутаність	20
2.2 Закон площини	21
2.3 Тензорні мережі і заплутаність	24
2.4 Середні операторів із тензорними мережами. Каноні- чна форма	29
2.5 Оптимізація MPS	32
2.6 Двовимірні тензорні мережі	36
2.7 Обчислення операторів й енергії	38
2.8 CTMRG. Частина 1.	40
2.9 CTMRG. Частина 2.	43
2.10 CTMRG. Частина 3	45
РОЗДІЛ 3 Тривимірні тензорні мережі	46
3.1 Оптимізація тривимірного iPEPS	46
3.2 Знаходження середніх: граничний PEPS	47
3.3 Знаходження середніх: CTMRG	52
РОЗДІЛ 4 Результати	59
ВИСНОВКИ	64
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	66

ВСТУП

Квантова заплутаність [1] – форма кореляції, яка може існувати лише в квантових системах, і є характерною властивістю квантової механіки. Ще у ранні роки квантової механіки заплутаність привертала увагу таких метрів, як Шредінгер та Ейнштейн. Зокрема, Ейнштейн у своїй статті із Розеном і Подольським [2], виходячи з ідеї заплутаності, запропонував, що квантова механіка є неповною і має бути змінена на класичну теорію із прихованими ступенями вільності. Набагато пізніше, Белл запропонував нерівності [3] (нині – нерівності Белла), які можуть порушуватись тільки у дійсно квантовій теорії, де можливі справжні заплутані стани. Аспе і Цайлінгер довели експериментально [4–6], що ці нерівності дійсно можуть бути порушені, за що були нагороджені Нобелівською премією у 2022 році. Таким чином було доказано, що квантова механіка не може бути змінена на класичну теорію, а сильно заплутані стани існують і можуть бути використані експериментально.

Друге дихання квантової заплутаності відкрилося із народженням ідеї квантових обчислень [7, 8]. Квантові алгоритми можуть вирішувати деякі задачі експоненційно швидше за класичні аналоги [9, 10], і заплутаність, як суто квантовий феномен, може бути одним із ресурсів для квантового пришвидшення (хоча і не єдиним, наприклад, алгоритм Гровера [11] не пов'язаний із заплутаністю). Крім того, деякі із методів реалізації квантових обчислень, а саме квантові обчислення на основі вимірювань [12] та топологічні квантові обчислення [13–15] ґрунтуються на створенні сильно заплутаних квантових станів із особливою структурою заплутаності.

Зацікавлення заплутаністю перейшло і до інших галузей фізики, до теорії конденсованого стану [16], теорії топологічних порядків [17–19], AdS/CFT відповідності [20, 21]. Були відкриті нові закони поведінки заплутаності у корельованих квантових системах багатьох тіл, такі як закони площини для заплутаності [22, 23]. Спектри заплутаності були пов'язані із граничною фізикою квантових систем і із топологічними властивостями фаз [24].

Заплутаність знайшла собі шлях і до галузі чисельних методів симуляції квантових систем. Серед таких методів потрібно насамперед відзначити теорію вкладання матриці густини (DMET) [25], апроксимацію Гутцвіллера та її узагальнення (GA) [26], а також методи тензорних мереж [27].

Надалі ми зосередимось на методах, заснованих на тензорних мережах.

Основна ідея тензорних мереж – знайти анзац для квантових станів і матриць густини, який би відповідав структурі заплутаності цих квантових станів і мав би досить малу кількість параметрів. Далі динаміка або пошук основного стану квантової системи скорочуються (проектуються) на ефективний простір цих параметрів. Додатковими умовами на тензорні мережі є здатність ефективно знаходити середні операторів для цих станів (без використання Монте-Карло методів) і здатність знаходити різні характеристики заплутаності станів, такі як ентропія заплутаності.

Для одновимірних квантових систем, як на решітках, так і в неперервному просторі, методи тензорних мереж (DMRG [28], TEBD [29], TDVP [30]) досягли такого рівня точності, що ці методи стають найпопулярнішим методом досліджень. Ці методи були також узагальнені на квазідвовимірні системи, і двовимірні системи на циліндрах малого діаметру, де вони теж дозволяють отримати досить точні результати. Такий успіх одновимірних тензорних мереж ґрунтується на одразу декількох властивостях. По-перше, для одновимірних тензорних мереж можна точно знайти середні значення операторів, зокрема, енергії [31]. Це дає змогу використовувати дуже ефективні алгоритми оптимізації для пошуку основного стану. По-друге, для одновимірних тензорних мереж складність алгоритму дуже повільно зростає в залежності від основних параметрів контролю алгоритму, що дозволяє досягти недоступної для інших випадків точності. По-третє, для одновимірних тензорних мереж можна досить легко розрахувати їх основні характеристики заплутаності, такі як ентропія заплутаності, спектр заплутаності та більш складні характеристики, такі як глобальна ентропія [32] або магія Белла (Bell magic) [33].

Для двовимірних систем ситуація набагато складніша. Існує декілька алгоритмів, які дозволяють працювати із двовимірними тензорними мережами. Але ці алгоритми мають набагато більшу обчислювальну складність і потребують більшого програмістського мистецтва [34]. Крім того, середні від операторів не можуть бути знайдені точно для двовимірних тензорних мереж, тому потрібно використовувати досить складні наближені методи ще й для обчислення середніх. На цей момент алгоритми двовимірних тензорних мереж є далекими від своєї остаточної розробки, й можна очікувати

їх подальшого вдосконалення у найближчі роки.

Для тривимірних квантових систем існує лише декілька наукових праць, де були спроби використовувати тензорні мережі [35, 36]. Це пов'язано з дуже значною складністю і великим часом обчислень, необхідним для навіть приблизного обчислення середніх від операторів для тривимірних систем за допомогою цих підходів. У цій роботі запропоновано, імплементовано і протестовано цілу низку нових алгоритмів, що здатні ефективно працювати з тривимірними тензорними мережами. Ці алгоритми дозволяють значно скоротити необхідний час обчислень для тривимірних тензорних мереж і отримати результати, що є близькими за точністю до результатів для двовимірних тензорних мереж. Подальше розвинення цих методів дозволить використовувати тензорні мережі для будь-яких фізичних квантових систем, незалежно від вимірності простору.

Огляд літератури

У рамках поточного дослідження нас будуть цікавити алгоритми на основі тензорних мереж для вивчення квантових спінових систем на тривимірних та двовимірних решітках. Тензорні мережі з'явилися незалежно у досить різних галузях фізики й математики. Перші праці можна пов'язати із роботами Крамерса і Ванье [37] у контексті апроксимації до класичних статистичних моделей на решітках. Пізніше ця техніка була використана Бакстером у розгляді класичних інтегрованих моделей [38, 39] (цікаво, що увесь метод Алгебраїчного підходу Бете до інтегрованих систем може бути переформульований на мові тензорних мереж [40]). Тензорні мережі незалежно були використані для вивчення квантових систем у контексті чисельних ренормалізаційних груп [28] (density matrix renormalization group, DMRG). DMRG був спочатку сформульований як узагальнення методу чисельної ренормалізаційної групи Вільсона (numerical renormalization group, NRG) [41] і тільки пізніше переформульований на мові тензорних мереж [42] (зазначимо, що NRG Вільсона був теж пізніше переформульований як алгоритм із тензорними мережами [43]). Зв'язок між DMRG і тензорними мережами дозволив зрозуміти, що причина ефективності DMRG була у природному геометричному представленні заплутаності квантових станів [22]. Подальший розвиток зв'язку між тензорними мережами, заплутаністю та конденсованими станами дозволив узагальнити алгоритми на основі тензорних мереж до динаміки у реальному часі [44], до двовимірних систем [45] та до багатьох інших застосувань. Тензорні мережі з'явилися й у математиці, у сфері топологічної квантової теорії поля (TQFT), де різні інваріанти вузлів та просторів можуть бути обчислені як згортки тензорних мереж, що відповідають триангуляції простору [46, 47]. З цього часу кількість праць й застосувань тензорних мереж постійно зростає. Для загального ознайомлення із сучасним станом галузі можна звернутися до [27, 48–51]. Далі ми обмежимося описом праць, які безпосередньо стосуються даної роботи.

У цій роботі ми будемо використовувати тензорні мережі для опису основного стану квантової системи багатьох тіл на регулярній решітці. Ефективність представлення основних станів у вигляді тензорних мереж ґрунтується на законах площини для заплутаності [22, 23, 52, 53]. В залежності від геометрії тензорної мережі, яку використовують для представ-

лення основного стану, розглядають декілька різних класів тензорних мереж і відповідних алгоритмів: одновимірні тензорні мережі (matrix product state, MPS, tensor train) [31, 54, 55], тензорні мережі на графі типу дерево (tree tensor networks, TTN) [56], тензорні мережі на гіперболічному графі із розмірністю простору на один більше ніж Гамільтоніан моделі (multi-scale entanglement renormalization ansatz, MERA) [57] і тензорні мережі на будь-яких двовимірних та тривимірних решітках (projected entangled pair states, PEPS) [27, 34] (існує ще й трохи інший тип двовимірних тензорних мереж – projected entangled simplex states, PESS [58]). У подальшому ми зосередимося на алгоритмах PEPS.

Теоретичні підходи з PEPS були успішно використані для симуляції магнітних квантових систем на стільниковій решітці [59], трикутній решітці [60], решітці Шастрі–Сазерленда [61], решітці кагоме [62]; для симуляції ферміонних систем [63–66], для дослідження властивостей кіральних спінових рідин [67–69], еволюції в часі [70, 71], симетричних станів [72], збуджених станів [73, 74], ненульових температур [75] тощо. Алгоритми на основі PEPS можливо приблизно класифікувати за двома критеріями: за методом оптимізації PEPS, та за методом обчислення середніх від операторів. Існують наступні методи оптимізації PEPS: просте оновлення (Simple Update) [34, 76, 77] – найпростіший, але доволі наближений метод оптимізації на основі еволюції хвильової функції в уявному часі; набагато точніший, але одночасно й обчислювально складніший метод повного оновлення (Full Update) [34, 78, 79]; градієнтні методи [80, 81], найточніші на даний момент; й методи засновані на ізометричному PEPS, який дає змогу створити двовимірний аналог DMRG [82, 83].

Перейдемо тепер до класифікації за методом обчислення середніх. Для більшості тензорних мереж у формі PEPS неможливо точно знайти середні значення від операторів. Виключенням є тільки ізометричні PEPS. Для усіх інших PEPS обчислення середніх значень виконується за допомогою наближених, але контрольованих алгоритмів. Ці алгоритми можна поділити на наступні типи: засновані на методі трансфер-матриці і представлення головуючого власного вектора цієї трансфер-матриці у формі MPS [78]; засновані на використанні різних варіантів тензорних груп ренормалізації [76, 84]; засновані на методах Монте-Карло [85] та на основі групи

ренормалізації кутової матриці переносу (corner transfer matrix renormalization group, CTMRG) [86]. Ми будемо у подальшому досить часто використовувати CTMRG. CTMRG був запропонований Нішіно и Окуніші на квадратній решітці [87, 88] як поєднання DMRG із попередніми працями Бакстера о кутових трансфер-матрицях [38, 39, 89, 90]. Перші застосування методу були до класичних моделей статистичної механіки на решітках, таких як модель Ізінга. Метод був також узагальнений до інших двовимірних решіток [91–93]. Для обчислення середніх значень хвильових функцій PEPS із CTMRG використовують також певні модифікації, які дозволяють зменшити час обчислень [94, 95].

Усі ці роботи досліджували застосування PEPS для вивчення двовимірних квантових систем. Для тривимірних систем усе набагато складніше. Існує лише декілька статей, які використовують PEPS до тривимірних систем. У праці [36] використовують просте оновлення для оптимізації хвильової функції і варіант тензорної ренормалізаційної групи для обчислення середніх. Статті [96–98] використовують сильно наближений метод (теж на основі простого оновлення) і для обчислення середніх значень. Через це їх метод може досить добре працювати лише для систем із щільною у спектрі. У праці [99] була спроба узагальнити ізометричні PEPS на тривимірні системи. На жаль, цей метод дозволив авторам досягти тільки розмірності зв'язку $D = 2$ (це основний параметр контролю алгоритмів із тензорними мережами, $D = 2$ – дуже мале значення, це фактично перший крок поза звичайною теорією середнього поля). Нарешті, у статтях [35, 100] була запропонована нова схема обчислень середніх із тривимірними тензорними мережами, яка дозволила авторам досягти $D = 4$. Саме ця схема була відправною точкою наших власних досліджень.

Після цього детального розгляду тензорних мереж перейдемо до фізичних моделей, які використано в нашій роботі. Ми починаємо із різних моделей Габбарда. Ці моделі природно з'являються як у фізиці ізоляторів Мотта і високотемпературних надпровідників [101], так й у фізиці ультрахолодних газів і оптичних решіток [102, 103]. У режимі ізолятора Мотта ці моделі можуть бути ефективно описані за допомогою гамільтоніанів спінових систем [103, 104], таких як модель Гейзенберга.

РОЗДІЛ 1

Моделі Габбарда й ефективні моделі Гейзенберга

У цьому розділі ми розглянемо клас моделей, які природно виникають у квантових системах на решітках. Такі системи з'являються в описі кристалічних решіток і фізики електронів у кристалах, або у теорії оптичних решіток із нейтральними атомами. У останньому випадку система може складатися і із бозонів. У першу чергу розглянемо модель Габбарда, що є моделлю-парадигмою для розгляду сильно-корельованих квантових систем на решітках.

Модель Габбарда була запропонована у 1963 році в роботах Габбарда, Гутцвіллера і Канаморі [105–107] для пояснення фізики сильних кореляцій у вузьких зонах. Варіанти моделі дають змогу вивчати широку низку фаз і ефектів [108]: такі як феромагнетизм [109], антиферомагнетизм [110], хвилі зарядової густини [111], надпровідність [112], топологічно впорядковані фази та інші.

У найпростішому вигляді модель містить два параметри: t , що характеризує ширину зони та U , що визначає амплітуду міжелектронної взаємодії. Баланс між цими двома факторами (а також між густиною електронів на елементарну комірку, що характеризує густину домішок у матеріалі) визначає фазову діаграму моделі. Існує також безліч модифікацій цієї моделі, які додають додаткові зони, стрибки між далекими вузлами решітки, або дальні взаємодії чи корельовані стрибки. Всі ці модифікації здатні приводити до екзотичної фізики.

Але навіть найпростіша версія моделі містить у собі цілу низку сильно-корельованих ефектів, таких як фазовий перехід між провідником і діелектричним станом Мотта при одиничному заповненні на елементарну комірку та високотемпературну (d-wave) надпровідність (а також різні фази спінових хвиль та хвиль густини) при легуванні системи домішковими електронами чи дірками.

Незважаючи на простоту, точний розв'язок моделі Габбарда можна отримати лише для одновимірної однозонної моделі (за допомогою підходу Бете). Тому з самого початку свого існування модель Габбарда стала тестом для розробки різних аналітичних і чисельних методів. Серед цих методів

потрібно відилити апроксимацію Гутцвіллера, діаграмні методи (насамперед три апроксимації Габбарда), метод Монте-Карло [113], теорію динамічного середнього поля [114], алгоритм Ланцоша [115], функціональну ренормалізаційну групу та інші.

1.1 Формулювання моделі Габбарда

Розглянемо спочатку як модель Габбарда виникає у кристалічних решітках при описі фізики електронів. У цьому випадку ми можемо вважати іони статичними (у рамках наближення наближення Борна–Опенгеймера), а електрони будуть рухатися у ефективному періодичному потенціалі цих іонів. У випадку оптичної решітки періодичний потенціал створюється не іонами, а зовнішньою структурою лазерів. Така система у загальному випадку може бути описана наступним гамільтоніаном:

$$\mathcal{H} = \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_p(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i < j} V_i(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (1.1)$$

де $V_p(\mathbf{r})$ – зовнішній періодичний потенціал (іонів чи оптичної решітки) і $V_i(\mathbf{r})$ – міжчастинковий потенціал взаємодії (це може бути кулонівський потенціал, його ефективна екранована версія або ефективний потенціал взаємодії нейтральних атомів у оптичній решітці). Будемо також вважати, що вся система визначена на торі із періодичними граничними умовами, і що існує тільки N елементарних комірок. Знехтуємо спочатку другим членом взаємодії (альтернативно можна взяти його до уваги за допомогою апроксимації Хартрі–Фока, але це не суттєво впливає на результати). Тоді частинки будуть рухатися без взаємодії у періодичному зовнішньому потенціалі, до якого ми можемо застосувати теорему Блоха. Для цього власні стани одночастинкового гамільтоніана

$$\mathcal{H}_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_p(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

необхідно представити як

$$\psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.3)$$

У цій формулі плоска хвиля $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ модулюється періодичною функцією $u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Період $u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ збігається з просторовим періодом ґратки. Індекс α позначає зону, а \mathbf{k} – вектор квазіімпульсу кристала, що належить до першої зони Бріллюена.

Надалі можна ввести функції Ваньє

$$w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (1.4)$$

де \mathbf{R}_i позначає вектор ґратки на вузлі i , а підсумовування проводять у всій зоні Бріллюена. Зазначимо, що функції Блоха мають бути нормалізовані. Перевага такої трансформації полягає у тому, що функції Ваньє – просторово локалізовані, і з ними можна визначити модель на решітці (на відміну від функцій Блоха, які повністю нелокальні). Існує і зворотне перетворення, що переводить функції Ваньє до функцій Блоха:

$$\psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} w_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (1.5)$$

Потрібно зазначити, що функції Ваньє для різних вузлів і різних зон є ортогональними.

Перейдемо тепер до формалізму вторинного квантування. Для цього ми введемо оператори народження та знищення для різних функцій Ваньє (або функцій Блоха). За визначенням оператор $c_{\alpha i, \sigma}^{\dagger}$ утворює частинку зі спіном $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ на вузлі i у зоні α , тоді як оператор $c_{\alpha i, \sigma}$ зменшує кількість частинок на одиницю (тобто анігілює частинку). Таким чином, $c_{\alpha i, \sigma}^{\dagger}$ та $c_{\alpha i, \sigma}$ називають операторами народження та знищення, відповідно.

Нагадаємо основні властивості $\hat{c}_{\alpha i, \sigma}^{\dagger}$ і $\hat{c}_{\alpha i, \sigma}$. По-перше, дія добутку $\hat{c}_{\alpha i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha i, \sigma}$ на хвильову функцію не змінює кількість частинок у системі, тобто, можна також записати $\hat{c}_{\alpha i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha i, \sigma} = \hat{n}_{i, \sigma}$, де $\hat{n}_{i, \sigma}$ – локальний оператор густини, який діє на вузлі i . У той же час зворотна комбінація для ферміонів відповідає $\hat{c}_{\alpha i, \sigma} \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^{\dagger} = 1 - \hat{n}_{i, \sigma}$. Це призводить до наступного антикомутаційного співвідношення:

$$\{\hat{c}_{\alpha i, \sigma}^{\dagger}, \hat{c}_{\alpha i, \sigma}\} = 1. \quad (1.6)$$

Або у загальному випадку:

$$\{\hat{c}_{\alpha i, \sigma}^\dagger, \hat{c}_{\alpha j, \sigma'}\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma \sigma'}, \quad (1.7)$$

δ_{ij} та $\delta_{\sigma \sigma'}$ – символи Кронекера. У свою чергу:

$$\{\hat{c}_{\alpha i, \sigma}^\dagger, \hat{c}_{\alpha j, \sigma'}^\dagger\} = \{\hat{c}_{\alpha i, \sigma}, \hat{c}_{\alpha j, \sigma'}\} = 0. \quad (1.8)$$

Усі ці формули можуть бути узагальнені на випадок бозонів, які можуть з'явитись у описі холодних газів нейтральних атомів у оптичних решітках. Зауважимо також, що спіновий індекс може приймати більший спектр значень, наприклад, якщо ми розглядаємо ферміонні нейтральні атоми із вищим спіном ядра.

Продовжуючи процедуру вторинного квантування введемо оператор поля [116]:

$$\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha i} w_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^\dagger; \quad (1.9)$$

$$\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha i} w_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i, \sigma}. \quad (1.10)$$

Оператор $\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ створює частинку зі спіном σ у точці \mathbf{r} , а $\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r})$ знищує ту саму частинку.

За допомогою (1.9) та (1.10) гамільтоніан можна представити у формалізмі вторинного квантування:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \sum_{\sigma} \int \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\mathcal{H}}_1 \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int \int \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') V_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \sum_{\sigma, \alpha, i, j} \int w_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^\dagger \hat{\mathcal{H}}_1 w_\beta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \hat{c}_{\beta j, \sigma} d\mathbf{r} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \\ i, j, m, n, \\ \sigma, \sigma'}} \int \int w^\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^\dagger w^\beta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) \hat{c}_{\beta j, \sigma'}^\dagger V_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &\times w_\gamma(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m) \hat{c}_{\gamma m, \sigma'} w_\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \hat{c}_{\delta n, \sigma} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Або у ще більш компактній формі

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma, \alpha, i, j} t_{ij}^{\alpha\beta} \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\alpha j, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \\ i, j, m, n}} U_{ijmn}^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{c}_{\alpha i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\beta j, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\gamma m, \sigma'} \hat{c}_{\delta n, \sigma}, \quad (1.12)$$

де матричні елементи $t_{ij}^{\alpha\beta}$ та $U_{ijmn}^{\alpha\beta\gamma\delta}$ дорівнюють

$$t_{ij}^{\alpha\beta} = \int w_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \hat{\mathcal{H}}_1 w_\beta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}; \quad (1.13)$$

$$U_{ijmn}^{\alpha\beta\gamma\delta} = \int \int w_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) w_\beta^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) V_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w_\gamma(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m) w_\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (1.14)$$

Застосуємо деякі наближення до гамільтоніана (1.12). Нас у подальшому не будуть цікавити усі зони системи. У випадку бозонів ми можемо розглядати тільки найнижчу зону за енергією. У випадку ферміонів ми маємо розглянути зону, яка розташована на поверхні Фермі. Крім того, ми додаємо додаткову умову, що ця зона відділена щілинами від сусідніх зон, і що взаємодії менші за ці щілини. За цих умов ми можемо залишити у гамільтоніані тільки оператори для однієї зони. По-друге, ми будемо вважати, що функції Ваньє для цієї зони досить добре локалізовані у просторі (насправді, існує деяка неоднозначність у виборі функцій Ваньє; цю неоднозначність можна використати для знаходження максимально локалізованих функцій Ваньє, які у випадку не топологічної зони будуть експоненційно локалізованими). Для таких експоненційно локалізованих функцій Ваньє інтеграли стрибків t_{ij} і взаємодій U_{ijmn} швидко зменшуються із відстанню між i, j або i, j, m, n . У випадку, якщо взаємодії спадають досить швидко, ми можемо залишити тільки доданок із $i = j = m = n$:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma, i, j} t_{ij} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_i \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{i, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{i, \sigma'} \hat{c}_{i, \sigma}. \quad (1.15)$$

У випадку спіну 1/2 виконують ще й додаткове спрощення

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma, i, j} t_{ij} \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger \hat{c}_{j, \sigma} + h.c. + U \sum_i \hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}. \quad (1.16)$$

Так само як ми спростили формулу взаємодій U_{ijmn} ми можемо спростити

й форму стрибків. А саме, ми можемо зробити припущення, що важливими залишаються тільки стрибки між найближчими сусідами $\langle ij \rangle$,

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\sigma, \langle ij \rangle} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}. \quad (1.17)$$

Цей гамільтоніан представляє найпростішу фізику ферміонів чи бозонів із однією динамічною зоною і відштовхуванням U . У випадку бозонів достатньо нульового спіну, бо на вузлі можуть знаходитися декілька бозонів, що можуть взаємодіяти між собою. До цього гамільтоніану можливо додати інші більш далекі взаємодії (наприклад, у експериментах в оптичних решітках досить часто виникають дипольні взаємодії), чи більш далекі стрибки (які, наприклад, потрібні для більш точного опису купратів).

Гамільтоніан моделі Габбарда комутиє з оператором повної кількості частинок. Тому, має сенс вивчати основний стан цього гамільтоніану за різних густин частинок. Виявляється, що фізика системи може бути досить різною в залежності від цієї густини n . Найбільш цікавими є випадки, коли n є близькою до одиниці, тобто в режимі напівзаповненої зони. Така густина відповідає різним діелектричним станам Мотта, а також фізиці купратів без домішкових атомів. За наявності домішок (електронних чи діркових), тобто за густини $n = 1 + \delta$, де для експериментально-важливих випадків надпровідності $|\delta| < 0.3$. За цих умов (для двовимірної моделі Габбарда), система може мати цілу низку сильно-корельованих фаз, таких як надпровідність або полосаті фази.

Нас далі буде цікавити фізика моделі для $n = 1$ (а також фізика бозонних аналогів при $n = 1, 2, \dots$). Необхідно розглянути два випадки: малих і великих U/t . У першому випадку взаємодію можливо вважати малою, та описувати її у рамках теорії збурень. Випадок $U = 0$ відповідає металевій фазі із поверхнею Фермі. Невеликі U/t залишають систему в стані Фермірідини та можуть бути описані за допомогою модифікації самоенергії.

Зі зростанням U/t відбувається фазовий перехід до діелектричного стану Мотта, який характеризується щільною у спектрі заряджених збуджених станів, і не проводить струм. Фізика у спіновому секторі може бути набагато складніше: так, система може знаходитись у магнітному стані, фазі валентних зв'язків (VBS) або у стані топологічної спінової рідини.

Більш того, можливі фазові переходи між різними спіновими фазами із варіацією U/t .

Незалежно від конкретної спінової фази фізика самого діелектричного стану Мотта залишається незмінною: стан пригнічує будь-які збурення і флуктуації у локальній електронній густині. Тому, на кожному вузлі решітки у режимі Мотта знаходиться рівно один електрон, а от його спін чи інші квантові числа можуть варіюватися. Це дає змогу знайти ефективну спінову (або із іншими ступенями вільності, такими як орбітальні числа) модель, у якій локальний гільбертовий простір на кожному вузлі зменшений. Наприклад, для моделі Фермі–Габбарда, ми можемо сформулювати ефективну спінову модель із спіном на кожному вузлі (тобто гільбертовим простором розмірності 2).

1.2 Ефективні спінові моделі

Як ми можемо знайти ефективну спінову модель у режимі $U/t \geq 1$? Ми бачимо, що оператори у гамільтоніані пропорційні до t змінюють локальну густину. Тому, такі оператори не можуть бути залишені в ефективному гамільтоніані. Оператор, пропорційний до U не порушує локальну густину, але він має експоненційно вироджений спектр, тому не може слугувати основою для теорії збурень, і для визначення структури основного стану.

Основна ідея полягає у введенні унітарного перетворення Шріффера–Вульфа [117], яке б залишило в гамільтоніані тільки оператори, які б комутували із локальною густиною. Тому треба знайти унітарний оператор вигляду e^{iS} , де $S = (t/U)S_0 + O(t^2/U^2)$. Ермітовий оператор S_0 обирають таким чином, щоб утворений гамільтоніан $e^{iS}He^{-iS}$ не змінював локальної густини. У випадку моделі Фермі–Габбарда трансформований гамільтоніан має форму гамільтоніану моделі Гейзенберга:

$$H = \frac{4t^2}{U^2} \sum_{\langle ij \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z] + O(t^3/U^2), \quad (1.18)$$

де S_i^σ – оператори σ -компоненти спіну на вузлі i . Для спіну $1/2$ ці оператори пропорційні до матриць Паулі. Локальні гільбертові простори тепер мають розмірність 2 (або розмірності спінового/орбітального простору для одного електрона на вузол у більш загальному випадку). Оператори наступного

порядку, які мають константу пропорційності t^3/U^2 , у загальному випадку включають до себе більш далекі спінові взаємодії і навіть взаємодії декількох спінів одночасно (наприклад, чотирьох спінів у кутах квадрату для квадратної решітки). Ці додаткові взаємодії можуть призводити до виникнення екзотичних фаз у режимі проміжних значень U/t , але ми не будемо їх розглядати у цій роботі.

Перед тим, як переходити до фізики моделі Гейзенберга, зробимо декілька додаткових зауважень щодо ефективних спінових моделей. Ефективна модель може бути знайдена не тільки для моделі Фермі–Габбарда зі спіном $1/2$, але й для моделей Фермі–Габбарда із вищим спіном, які можуть з'явитися в описі експериментів на оптичних решітках. У цьому випадку, можливо отримати різні варіанти $SU(n)$ моделей Гейзенберга. Крім того, аналогічні обчислення можна провести для бозонних моделей Габбарда, які теж можуть мати діелектричну фазу Мотта для цілочисельних заповнень вузлів ґратки частинками. У випадку, коли існує декілька різних бозонів (наприклад, декілька спінів), то можна аналогічним чином побудувати ефективну спінову модель, яка теж буде узагальненням моделі Гейзенберга.

Перейдемо тепер до фізики моделі Гейзенберга за нульової температури. Нас буде цікавити основний стан системи і структура елементарних збуджень. По-перше, цей гамільтоніан пропорційний $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ для кожної пари сусідніх спінів. Якщо б ці оператори були класичними векторами, то мінімум цієї функції досягався би для такої конфігурації спінів, для якої напрямки спіну на кожному вузлі антипаралельні до напрямків спінів на усіх сусідніх вузлах. Для решіток, які можуть бути розділені на дві однакові підрешітки (квадратна, кубічна, стільникова), ця умова відповідає антиферромагнітизму. Для інших решіток, таких як трикутна, може виникати більш складний магнітний порядок, наприклад, зі спінів з кутами у $2\pi/3$ між собою. Модель Гейзенберга на решітці кагоме має своїм основним станом безщільну спінову рідину [95] (точний тип якої все ще є предметом дискусій), а тривимірна пірохлорова решітка містить топологічну спінову рідину із тривимірним Z_2 топологічним порядком [77]. У цій роботі нас будуть цікавити тільки магнітні фази із простим антиферромагнітним порядком.

Антиферромагнітний порядок можна характеризувати двома порушеними симетріями: порушеною трансляційною симетрією, тобто елементарна комірка має містити не один, а два вузли, і порушеною неперервною $SU(2)$ симетрією, яка характеризується ненульовою намагніченістю $m = \sqrt{\langle S^x \rangle^2 + \langle S^y \rangle^2 + \langle S^z \rangle^2}$. Порушена неперервна симетрія призводить до декількох наслідків. Із теореми Голдстоуна випливає, що в спектрі збуджень системи будуть безщілинні голдстоунівські бозони – спінові хвилі. Наявність цих спінових хвиль у свою чергу створює кореляції далекого діапазону в основному стані системи. А саме, кореляційні функції вигляду $C(i, j) = \langle (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle) \rangle$ згасають алгебраїчно з відстанню $|i - j|$. У наших подальших чисельних обчисленнях ми будемо мати експоненційну залежність кореляційних функцій $C(i, j) \propto \exp[-|i - j|/\xi(D)]$, де $\xi(D)$ – кореляційна довжина, а D – параметр контролю точності алгоритму. Зі збільшенням D точність алгоритму зростає, а $\xi(D) \rightarrow \infty$. Тому кореляційну довжину можна використовувати як один з параметрів для екстраполяції результатів. Більш детально ми опишемо процедури екстраполяції у розділі з результатами.

У описі алгоритмів тензорних мереж ми також будемо використовувати модель Галдейна [118, 119]. Це одновимірна модель на ланцюзі з гамільтоніаном Гейзенберга та спіном 1, тобто локальним гільбертовим простором розмірності 3. Основний стан моделі має декілька цікавих властивостей. По-перше, ця система не має порушених симетрій, а намагніченість дорівнює нулю. По-друге, вона має щілину в спектрі елементарних збуджень [120, 121], які пропагують у ланцюзі, але на границях системи існують вироджені локалізовані стани (edge modes). Такий стан системи називають симетрійно захищеним топологічним станом (SPT) [122, 123], і він не може бути переведений без фазового переходу і без порушення усіх захисних симетрій до тривіального стану. Такі стани також мають досить цікаву структуру заплутаності – їх спектр заплутаності завжди вироджений, що ми перевіримо у наступному розділі [124].

РОЗДІЛ 2

Тензорні мережі

Сильні взаємодії можуть приводити до виникнення сильно корельованих фаз матерії, таких як топологічні порядки [18], взаємодійні топологічні діелектрики [125], критичні системи з деконфайнментом [126], дивні метали [127] та інші екзотичні стани матерії. Особливістю таких фаз є нетривіальна заплутаність [1, 7] – особлива форма квантової кореляції. Тому для теоретичного або чисельного дослідження таких систем необхідні методи, які б дозволили ефективно працювати із сильно заплутаними станами. Тензорні мережі [27, 49] – саме такий клас методів, які дозволяють ефективно представляти хвильові функції і оператори густини фізичних сильно-корельованих систем. У цьому розділі ми спочатку даємо вступ до квантової заплутаності й квантової теорії інформації [7], приводимо закон площини, з якого вже виводимо ідею тензорних мереж. Можливості тензорних мереж продемонстровані на прикладі одновимірного ланцюгу Галдейна за допомогою алгоритму іTEBD [29]. Далі ми показуємо як іTEBD може бути узагальнено на двовимірні системи, і пояснюємо алгоритми CTMRG [87].

2.1 Квантова заплутаність

Розглянемо спочатку систему з одного спіну $1/2$. Гільбертовий простір такої системи має розмірність 2 із ортонормованими базисними векторами $|+\rangle, |-\rangle$. Будь-який стан у цьому просторі може бути представлений як $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$, де α, β – довільні комплексні константи, і $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Розглянемо тепер систему із двох спінів. Гільбертовий простір такої системи є тензорним добутком гільбертових просторів станів окремих спінів, і тому має вимірність $2 \times 2 = 4$ із базисом $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$. Уявимо спочатку, що спіни не взаємодіяли раніше між собою (або з якимось третім спіном). Тоді стани цих двох спінів мають бути незалежними один від одного, і ми можемо записати загальний такий стан у наступному вигляді: $|product\rangle = (\alpha|+\rangle + \beta|-\rangle) \otimes (c|+\rangle + d|-\rangle)$, де \otimes – білінійний тензорний добуток, який діє на базисні вектори наступним чином: $|+\rangle \otimes |+\rangle = |++\rangle$. Ми будемо називати такі стани факторизованими станами (factorized states, product states), тому що вони можуть бути факторизовані у тензорний добуток станів окремих спінів. Факторизовані стани є основою багатьох

середньо-польових підходів до систем на решітках і можуть успішно описувати більшість звичайних фаз зі порушеною симетрією.

Однак, зовсім не всі стани двох спінів можуть бути факторизовані. Розглянемо, наприклад, один із станів Белла: $|Bell\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|++\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|--\rangle$. Цей стан не може бути факторизований, і тому є заплутаним. Спробуємо кількісно оцінити ступінь заплутаності цього стану. Для цього знайдемо зведену матрицю густини цього стану для одного зі спінів. Зведена матриця густини може бути знайдена у такий спосіб: спочатку ми знаходимо повну матрицю густини стану $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, а потім обчислюємо неповний слід цієї матриці за усіма станами, що не характеризують вибраний спін $\rho_{red} = \text{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|)$, де у даному випадку B – другий спін. У більш загальному випадку ми маємо розділити систему на дві частини – A, B і знайти зведену матрицю густини для підсистеми A як неповний слід за гільбертовим простором підсистеми B . Для стану Белла зведена матриця густини для першого спіну: $\rho_{red} = \frac{1}{2}|+\rangle\langle+| + \frac{1}{2}|-\rangle\langle-|$. Ми бачимо, що ця матриця густини не є матрицею густини чистого стану. Ми можемо обрахувати для неї ентропію фон Неймана: $S = -\text{Tr}(\rho_{red} \log \rho_{red}) = \log 2$. Ентропію зведеної матриці густини називають ентропією заплутаності між двома спінами. Для стану Белла ця ентропія максимальна, тому ми можемо вважати, що стан Белла – максимально заплутаний. У протилежному випадку – для факторизованих станів ентропія заплутаності дорівнює нулю.

2.2 Закон площини

У фізичних системах заплутаність зазвичай не абияка, а виконує цілу низку законів та правил. Нас цікавлять два таких закони – закон площини [22, 23] і моногамія заплутаності [128], тому що ці закони можуть бути використані як основа для розробки чисельних методів розв’язку сильно взаємодійних квантових систем. Ми не будемо тут приводити математичне твердження моногамії заплутаності, але приведемо її інтуїтивний зміст: квантова заплутаність це ресурс, який має бути розподілений між різними потенційними партнерами по заплутаності. Наприклад, якщо ми маємо три спіни, то ми можемо або максимально заплутати два спіни, і тоді третій має бути факторизований від перший двох; або ми можемо заплутати між собою усі три спіни, але тоді ці спіни вже не можуть бути попарно максимально заплутаними – ми маємо якось розподілити заплутаність між

трьома спінами. Які висновки ми можемо зробити із моногамії заплутаності? Роздивимось дві системи – одновимірний ланцюг зі спінів і тривимірну гранецентровану решітку таких саме спінів. Припустимо також, що спіни взаємодіють тільки з найближчими сусідами. Тоді кожний спін у таких системах буде заплутаний здебільшого із своїми найближчими сусідами, але у ланцюзі таких сусідів тільки два, а у гранецентрованій ґратці – $z = 8$. Оскільки у першому випадку заплутаність має бути розподілена між двома спінами, а у другому – між вісьмома, то у ланцюзі сусідні спіни будуть зазвичай набагато більш заплутаними, ніж у тривимірній системі. З цієї причини середньо-польові підходи, які ґрунтуються на факторизованих станах, стають все більш точними у системах з великою просторовою розмірністю. З іншої сторони, одновимірні та двовимірні системи легко проявляють сильно корельовану і заплутану фізику, таку як дробовий квантовий ефект Холла [129] або високотемпературну надпровідність [101]. Тривимірні системи, які будуть цікавити нас у цій праці, знаходяться посередині у цій ієрархії заплутаності. З одного боку, середньо-польові підходи, такі як наближення Хартрі–Фока, варіанти теорії функціоналу густини [130], або більш складна динамічна теорія середнього поля [131] здатні досить точно описувати більшість фаз у тривимірних системах. Але існують також і моделі, такі як модель Гейзенберга на пірохлоровій решітці [132], про які відомо, що вони можуть проявляти екзотичні фази, такі як тривимірна спінова рідина [133]. Тому тривимірні решітки слугують межею між середньо-польовими підходами для систем із великою розмірністю та підходами, заснованими на заплутаності, які були розвинуті для низьковимірних систем.

Інший важливий закон поведінки заплутаності – це закон площини [22, 23], який відображає локальність заплутаності у основному стані квантової системи з локальним гамільтоніаном. Для цього закону необхідно, щоб взаємодії були локальні: гамільтоніан має бути представлений як сума операторів, які діють тільки на декілька близьких сусідів, і цих сусідів має бути досить мало. Моделі Гейзенберга та Габбарда з попереднього розділу є прикладами таких гамільтоніанів. Потрібно зазначити, що закон площини досить часто виконується і для більш складних гамільтоніанів, які містять, наприклад, дипольярні взаємодії або системи атомів у оптичних резонаторах [134]. Прикладом фізично цікавої системи для якої закон площини не бу-

де виконуватися у загальному випадку – моделі SYK (Sachdev–Ye–Kitaev) [135], які описують фізику дивних металів. Для локальних гамільтоніанів закон площини можливо сформулювати наступним чином. Побудуємо спочатку граф взаємодій системи, де окремі ступені вільності (наприклад, спіни у моделі Гайзенберга) є вузлами графу, а ребра графу поєднують сусідів (де сусідство визначається за наявністю сильних взаємодій у гамільтоніані). Граф буде мати малу зв'язність на кожному вузлі, так як за визначенням локальності сусідів має бути мало. Розділимо тепер граф на дві зв'язні частини A і B . Для основного стану квантової системи ми можемо знайти ентропію заплутаності $S(A, B)$ для поділу системи на ці дві частини. Закон площини стверджує, що для систем із щілиною в спектрі ентропія заплутаності буде пропорційна до площини границі між частинами A і B : $S(A, B) \propto \partial A$, де площа границі може бути обрахована як кількість ребер графа, що проходять крізь площину, яка розділяє A і B . Для систем без щілини у спектрі збуджених станів закон площини може мати логарифмічні поправки.

Покажемо тепер, що закон площини є дуже нетривіальним обмеженням на заплутаність квантової системи. Найбільшу ентропію заплутаності має одинична матриця густини, ентропія якої дорівнює $S = \log D(H)$, де $D(H)$ – розмірність гільбертового простору. Нехай тепер підсистема A містить N спінів, із гільбертовим простором кожного спіну розмірності 2. Тоді $D(H) = 2^N$ і $S(A, B) \propto N$. Але N – це фактично об'єм підсистеми A , тобто кількість вузлів у підсистемі. Для досить регулярних графів об'єм N може бути набагато більше ніж площа границі. Тобто, закон площини стверджує, що для основного стану квантової системи заплутаність набагато менше за максимально можливу. Більш того, для випадкових станів у гільбертовому просторі ентропія буде пропорційна саме до об'єму підсистеми, а не до площини границі. Тому закон площини може виконуватися тільки для дуже малого шару із простору усіх станів гільбертового простору і саме ці стани можуть бути основними станами локального гамільтоніану.

Приведемо тепер прості приклади аплікації закону площини. Розглянемо моделі Гейзенберга зі спінами $s = 1/2$ і $s = 1$ на одновимірному ланцюзі і двовимірній квадратній решітці. Граф взаємодій системи у такому разі збігається з решіткою. Нехай ланцюг складається з L вузлів. Розділимо

ланцюг десь посередині на дві частини, з довжинами N і $(L - N)$ вузлів, де $N < (L - N)$. Якщо спін дорівнює $s = 1$, то модель Гейзенберга на ланцюзі знаходиться у фазі Галдейна, яка має щілину у спектрі елементарних збуджень. Тоді ентропія запутаності між двома підсистемами має бути приблизно постійною і малою, незалежно від N , тому що границя між двома підсистемами проходить тільки крізь одно ребро ланцюгу. Якщо ж спін дорівнює $s = 1/2$, то система не має щілини у спектрі і описується на малих енергіях конформною теорією поля Весса–Зуміно–Віттена (WZW model) [136]. У цьому випадку виникають логарифмічні поправки до закону площини і ентропія запутаності зростає за законом $S \propto \log N$, де константа пропорційності пов'язана із центральним зарядом конформної теорії поля (що є одним із найефективніших способів як знайти центральний заряд з чисельних розрахунків) [137]. У будь-якому разі, обидві ентропії запутаності мають набагато кращий скейлінг з N ніж випадковий стан у гільбертовому просторі ланцюга, який би мав ентропію запутаності пропорційну до N . Розглянемо тепер двовимірну решітку. Як і в одновимірному випадку, $s = 1/2$ система не має щілини у спектрі і знаходиться у антиферромагнітному стані із спонтанно порушеною симетрією, а $s = 1$ система може знаходитися у фазі SPT із щілиною в спектрі (за умови додаткової анізотропії [138]). Розглянемо нескінченну ґратку і виберемо в якості підсистеми A квадрат розміру $N \times N$. Тоді для $s = 1$ маємо $S(A, B) \propto N$, для спіну $s = 1/2$ ентропія $S(A, B) \propto N \log N$, а для випадкового стану – $S(A, B) \propto N^2$.

2.3 Тензорні мережі і запутаність

Тензорні мережі [27, 139] – це загальний вид алгоритмів та аналітичних методів, які дозволяють вирішувати цілу низку задач фізики сильно-корельованих квантових систем, моделей класичної статистичної механіки (наприклад, моделей Ізінга чи Поттса), задач лічби і комбінаторики [140–142] та симуляції диференціальних рівнянь у часткових похідних [143]. Крім того, тензорні мережі використовують у машинному навчанні [144] та у аналізі зображень [145]. Перед тим як переходити до застосувань тензорних мереж до квантової теорії інформації дамо стислий вступ до позначень.

У загальному випадку тензор – це масив даних із декількома індексами. Наприклад, вектор чи матриця (оператор) є тензорами з одним чи двома

індексами відповідно. T_{ijk} , де індекси i, j, k пробігають значення від 1 до M , позначає тензор з трьома індексами. Кількість індексів тензору – це його ранг. Хвильові функції системи із N спінів є прикладами тензорів рангу N , тому що для визначення цієї хвильової функції потрібно задати коефіцієнти $c_{i_1 i_2 \dots i_N}$, де індекси i_k приймають значення у базисних станах k -ого спіну. Визначимо тепер операції між тензорами. Звичайно, тензори однакового рангу і розмірності усіх індексів можливо додавати і віднімати один від одного. Крім того, тензори можна помножувати на константу. Але найважливішою операцією для нас буде згортка двох індексів, які належать двом різним тензорам. Наприклад, нехай задані два тензори T_{ijk} і P_{mnr} . Якщо третій індекс першого тензора і перший індекс другого тензора мають однакову розмірність, то ми можемо згорнути цей індекс і визначити наступний тензор: $R_{ijnr} = \sum_k T_{ijk} P_{knr} = T_{ijk} P_{knr}$, де ми використали правило сум Ейнштейна, за яким за індексом, який повторюється між двома тензорами, має проводитись підсумовування. В результаті згортки ми отримали тензор R рангу 4. У подальших обчисленнях нам досить часто будуть зустрічатися вирази зі згортками багатьох індексів між досить великою кількістю тензорів (у деяких випадках – нескінченною кількістю тензорів). Такі суми досить складно записати на папері зі звичайними позначеннями (бо вже не вистачає літер для позначення окремих індексів), і навіть коли такі суми все ж таки записані – це не додає їм інтуїтивного змісту. Тому ми будемо використовувати графічне зображення згорток тензорів, запропоноване Пенроузом [146]. У цих позначеннях, кожному тензору відповідає вузол графу (зазвичай із якоюсь позначкою, яка визначає який саме це тензор), а кожному індексу цього тензора – ребро графу, що починається (чи закінчується, але ми тут будемо вважати, що граф не має орієнтації ребер) на відповідному вузлі. Якщо якийсь індекс між двома тензорами згортається, то відповідні ребра графу поєднуються між собою. Таким чином, тензори – це вузли графу, згорнуті індекси – закриті ребра, а незгорнуті індекси – відкриті ребра графу (тобто ребра, які мають тільки один граничний вузол), див. також Рис. 2.1(а).

Тепер ми можемо ввести поняття тензорної мережі. У загальному випадку, тензорна мережа – це досить великий граф із багатьма вузлами, і набір тензорів, які відповідають вузлам графу. Нехай у мережі є k відкри-

тих ребер. Тоді мережа є відображенням тензору рангу k і задача згортки мережі буде задачею знаходження цього тензору. Зазначимо, що ця задача може бути дуже складною, тому що у мережі може бути багато закритих ребер, а складність згортки є експоненційною (у загальному випадку) за кількістю закритих ребер.

Як ми можемо використати тензорні мережі у фізиці? Одне з популярних застосувань пов'язано з моделями статистичної механіки. Більшість моделей класичної статистичної механіки на ґратках, такі як моделі Ізінга, Поттса чи димерів, можуть бути сформульовані мовою тензорних мереж, а саме статистична сума може бути представлена як тензорна мережа без відкритих ребер, де граф мережі збігається з ґраткою, на якій визначена модель статистичної механіки, а тензори у вузлах графу пов'язані із ваговими коефіцієнтами моделі [49].

Але більш популярними тензорні мережі стали у квантовій фізиці. Повернемося до хвильової функції системи із багатьма спінами. Ця хвильова функція є тензором із кількістю індексів рівною до кількості спінів. В загальному випадку, для досить великої кількості спінів, ми навіть не здатні вмістити хвильову функцію у пам'ять нашого комп'ютера, тому що кількість коефіцієнтів у хвильовій функції зростає експоненційно за кількістю спінів. З цієї причини алгоритми засновані на точній діагоналізації, чи точній симуляції динаміки квантової системи неможливі для систем із кількістю спінів більшою за $N = 40 - 44$. Ідея алгоритмів тензорних мереж полягає у спробі представити хвильову функцію як згортку N -тензорів малого рангу. Якщо це можливо, то пам'ять необхідна для представлення хвильової функції буде пропорційною до кількості спінів N , а не до експоненти 2^N . Як було зазначено вище, тензорна мережа – це не тільки набір тензорів, але ще й граф, який показує, як згортати ці тензори між собою. Важливим питанням є визначення графу тензорної мережі, необхідної для апроксимації заданої хвильової функції. Припустимо тепер, що ми хочемо представити у вигляді тензорної мережі основний стан квантової системи на якійсь решітці з локальними взаємодіями. Тоді для основного стану має виконуватися закон площини заплутаності. Виявляється, що такий саме закон площини буде виконуватись і для будь-якої тензорної мережі, графом якої є ця сама решітка. З цього походить пропозиція, що основний

стан квантової системи на решітці з локальним гамільтоніаном може бути представлений як тензорна мережа на цій решітці.

Для ілюстрації принципу побудови тензорної мережі розглянемо одновимірну систему спінів на ланцюгу з N спінів. Ми можемо представити основний стан такої системи як згортку N тензорів $A_{k, \alpha_{k-1} \alpha_k}^{i_k}$ рангу 3, де індекс i_k – це фізичний індекс, який приймає значення у базисі гільбертового простору k -ого спіну, а α_{k-1}, α_k – додаткові індекси розмірності D . Оскільки фізична модель була визначена на ланцюзі, то й тензорна мережа має граф у вигляді ланцюга. У цьому випадку ми здатні не тільки намалювати цю мережу (див. Рис. 2.1(b)), але й записати цю згортку явно за допомогою підсумовувань:

$$c_{i_1 i_2 \dots i_N} = A_{1 \alpha_1}^{i_1} A_{2, \alpha_1 \alpha_2}^{i_2} A_{\alpha_2 \alpha_3}^{i_3} \dots A_{\alpha_{N-2} \alpha_{N-1}}^{i_{N-1}} A_{\alpha_{N-1}}^{i_N}. \quad (2.1)$$

Таку архітектуру тензорної мережі називають станом матричного добутку (matrix product state, MPS). Зверніть увагу, що перший і останній тензори мають тільки по одному додатковому індексу. Це пов'язано з тим, що геометрія ґратки – ланцюг із двома граничними спінами. Якщо б геометрія моделі була періодичним кільцем, то перший і останній тензори мали б по два додаткових індекси, які б згорталися між першим та останнім тензорами. MPS можливо узагальнити на будь-які двовимірні чи тривимірні решітки, хоча тензори тоді будуть мати більший ранг. Наприклад, на квадратній решітці (див. Рис. 2.1(c)) тензори будуть п'ятого рангу, із одним фізичним і чотирма додатковими індексами розмірності D . Такі двовимірні або тривимірні стани називаються проєктовані стани заплутаних пар (projected entangled pair states, PEPS) і будуть надалі використовуватись у наших алгоритмах.

Перед тим як почати практично працювати із тензорними мережами, покажемо на прикладі MPS, що для них виконується закон площини для заплутаності. Розділимо ланцюг на дві частини, де до першої будуть входити усі спіні з першого до k -ого. Тоді хвильову функцію можна представити як суму $|g\rangle = \sum_{\alpha_k=1}^D L_{\alpha_k}^{i_1 i_2 \dots i_k} R_{\alpha_k}^{i_{k+1} i_{k+2} \dots i_N}$, де тензори L і R є згортками усіх тензорів A з MPS, які знаходяться до та після k -ого спіну, відповідно. Така факторизація стану показує, що ранг редукованих матриць густини цього стану не може бути більшим за D , і тому ентропія заплутаності такого

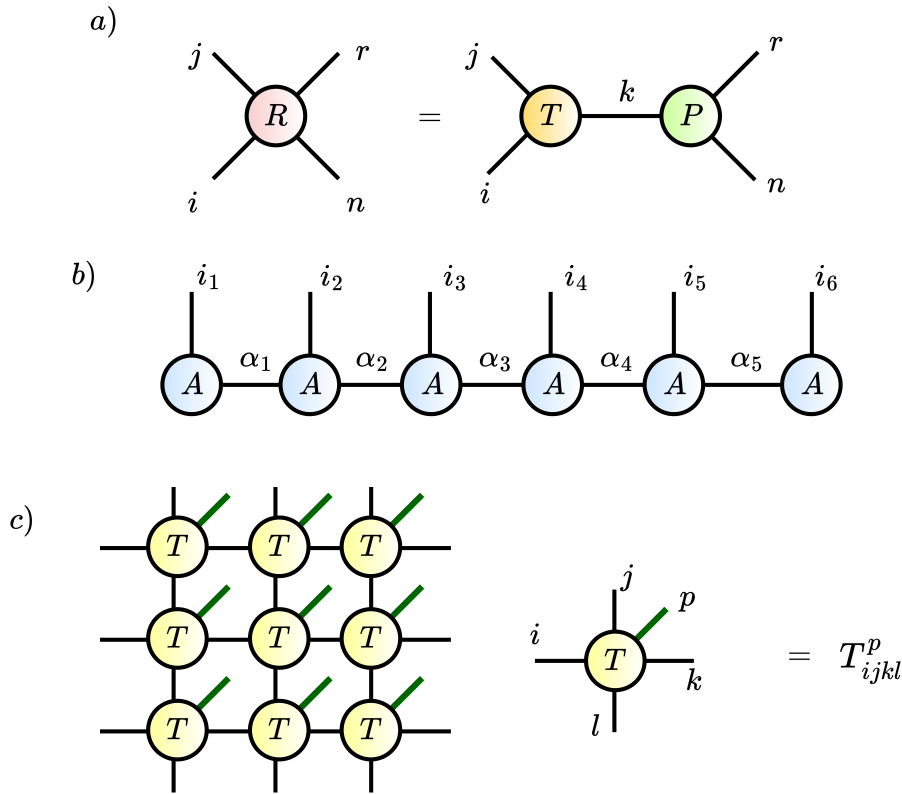


Рис. 2.1: а) Графічна діаграма для згортки двох тензорів $R_{ijmn} = T_{ijk}P_{knr}$. б) Графічне зображення тензорної мережі MPS. в) Графічне зображення тензорної мережі PEPS на квадратній решітці.

стану обмежена згори $S < \log D$. Таке обмеження виконується для всіх k . Тому ентропія заплутаності для будь-якого розділу системи на дві частини обмежена константою, що і є визначенням закону площини для одновимірного ланцюга. Тому MPS автоматично виконують закон площини і можуть слугувати апроксимацією основних станів одновимірних квантових систем.

З наведеної нерівності для ентропії заплутаності також впливає фізичний зміст розмірності додаткових індексів D – це фізичне обмеження на можливу заплутаність стану, представленого тензорною мережею. У подальших обчисленнях ми будемо досить часто починати працювати із малими D , а потім поступово збільшувати цей параметр, дозволяючи тензорній мережі представляти все більшу заплутаність. У ліміті $D \rightarrow \infty$ усі результати будуть точними. Доцільно також коротко узагальнити це міркування на більш складний випадок двовимірних і тривимірних систем. Нехай система розділена на дві частини, і розділ перетинає M додаткових індексів. Тоді хвильову функцію можливо записати теж як суму з D^M доданків, де кожен доданок є добутком хвильових функцій у двох різних

частинах розділу. Тоді ентропія запутаності такого розділу обмежена нерівністю $S(A, B) < M \log D$. Але M – це кількість додаткових індексів, які перетинає поверхня розділу, і ця кількість пропорційна до площини поверхні. Тобто ентропія запутаності обмежена згори площиною поверхні розділу, і тензорна мережа виконує закон площини і у двовимірному чи тривимірному випадках.

Наостанок додамо, що системи з логарифмічною поправкою до закону площини теж можуть бути представлені як тензорні мережі, але з більш складним графом. Цей граф має додатковий “голографічний” вимір, аналогічний до AdS/CFT (анти-де-Сіттер/ конформна теорія поля) дуальності [147], і здатний своєю геометрією включати логарифмічний фактор. Такі тензорні мережі називаються MERA [148], і мають досить цікаві властивості (такі як емерджентні гравітаційні взаємодії AdS простору [149, 150]), але виходять за межі основних завдань цієї роботи.

2.4 Середні операторів із тензорними мережами. Канонічна форма

Спробуємо на прикладі MPS знайти середнє значення оператора O , де оператор O має підтримку тільки на одному чи двох сусідніх вузлах ланцюгу. Середнє значення оператору тоді має форму $\langle O \rangle = \frac{\langle \psi | O | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$. На графічному представленні тензорних мереж обчислення цього середнього значення представлено на Рис. 2.2(a). Надалі ми будемо вважати, що система нескінченна, і має якусь періодичну структуру, наприклад, тензори MPS повторюються через кожні два тензори (такий періодичний анзац доволіний для розгляду більшості антиферромагнітних чи ферромагнітних систем). Тоді обчислення середнього значення оператора приймає форму згортки нескінченної періодичної тензорної мережі. На щастя, така згортка може бути проведена точно. Для цього ми можемо спочатку виділити матрицю трансферу T , зображену на Рис. 2.2(b). Для цієї матриці ми можемо знайти праві та ліві власні вектори $|\lambda_{r,i}\rangle$ і $\langle \lambda_{l,i}|$, відповідно, з власним значенням λ_i . Оскільки у термодинамічному ліміті матриця T зліва і справа помножується сама на себе нескінченну кількість разів, тільки найбільше власне значення λ_0 і відповідні власні вектори $|r\rangle$ і $\langle l|$ мають якесь значення. За допомогою цих власних векторів, ми можемо переписати середнє значення оператора як компактну скінченну тензорну мережу, яка зображена на

Рис. 2.2(c).

Наведена мережа може бути вже легко обчислена. На жаль, ця процедура все ж таки потребує знаходження власних векторів трансфер-матриці. Крім того, оптимізація тензорної мережі, яка буде розглянута у наступному підрозділі, теж потребує знаходження власних векторів і доволі складного алгоритму оптимальної трункації. Тому досить економним є можливе введення так званої канонічної форми MPS, мета якої зробити власні вектори $|r\rangle$ і $|l\rangle$ тривіальними символами Кронекера [31]. Для цього повернемося до визначення MPS і розглянемо додаткові індекси α_k . У хвильовій функції ці індекси завжди попарно згорнуті. Тому в нас є можливість завжди замінити просту згортку на добуток $X \times X^{-1}$, де X – будь-яка матриця розмірності $D \times D$, після чого матриці X і X^{-1} можливо включити до сусідніх тензорів A_k, A_{k+1} . MPS не зміниться від такої процедури. Тому в нас є певна калібрувальна вільність щодо вибору тензорів A , яка не змінює MPS у цілому. Можна спробувати знайти такі матриці X , щоб власні вектори трансфер-матриці T стали тривіальними символами Кронекера.

Щодо задачі знаходження канонічної форми MPS, така можливість дійсно існує, але потребує ще додаткового введення діагональних позитивних матриць $\lambda_{b,k}$ на кожному додатковому індексі α_k . MPS у канонічній формі зображений на Рис. 2.2(d) і складається з матриць λ_b і тензорів третього рангу Γ . На ці матриці і тензори мають бути накладені умови, що графічно зображені на Рис. 2.2(e). У праці [79] показано алгоритм, за допомогою якого можна трансформувати будь-який MPS до еквівалентного у канонічній формі (процедура трансформації включає тільки ітеративні калібрувальні перетворення). Після трансформації до канонічної форми середні значення операторів можуть бути знайдені значно легше і не потребують діагоналізації трансфер-матриці.

Зазначимо, що коефіцієнти матриці λ_b мають фізичний зміст і характеризують заплутаність квантового стану. А саме, ентропія заплутаності може бути знайдена як $S = -\sum_i \lambda_{b,i}^2 \log \lambda_{b,i}^2$ (де виконана умова нормування $\sum_i \lambda_{b,i}^2 = 1$). Крім того, самі коефіцієнти $\lambda_{b,i}^2 = \exp[-E_i]$, де E_i – спектр заплутаності -ще одна важлива характеристика заплутаності квантового стану. Наприклад, виродженість цього спектру може слугувати одним із критеріїв симетрично захищеного топологічного порядку (SPT фази) [124].

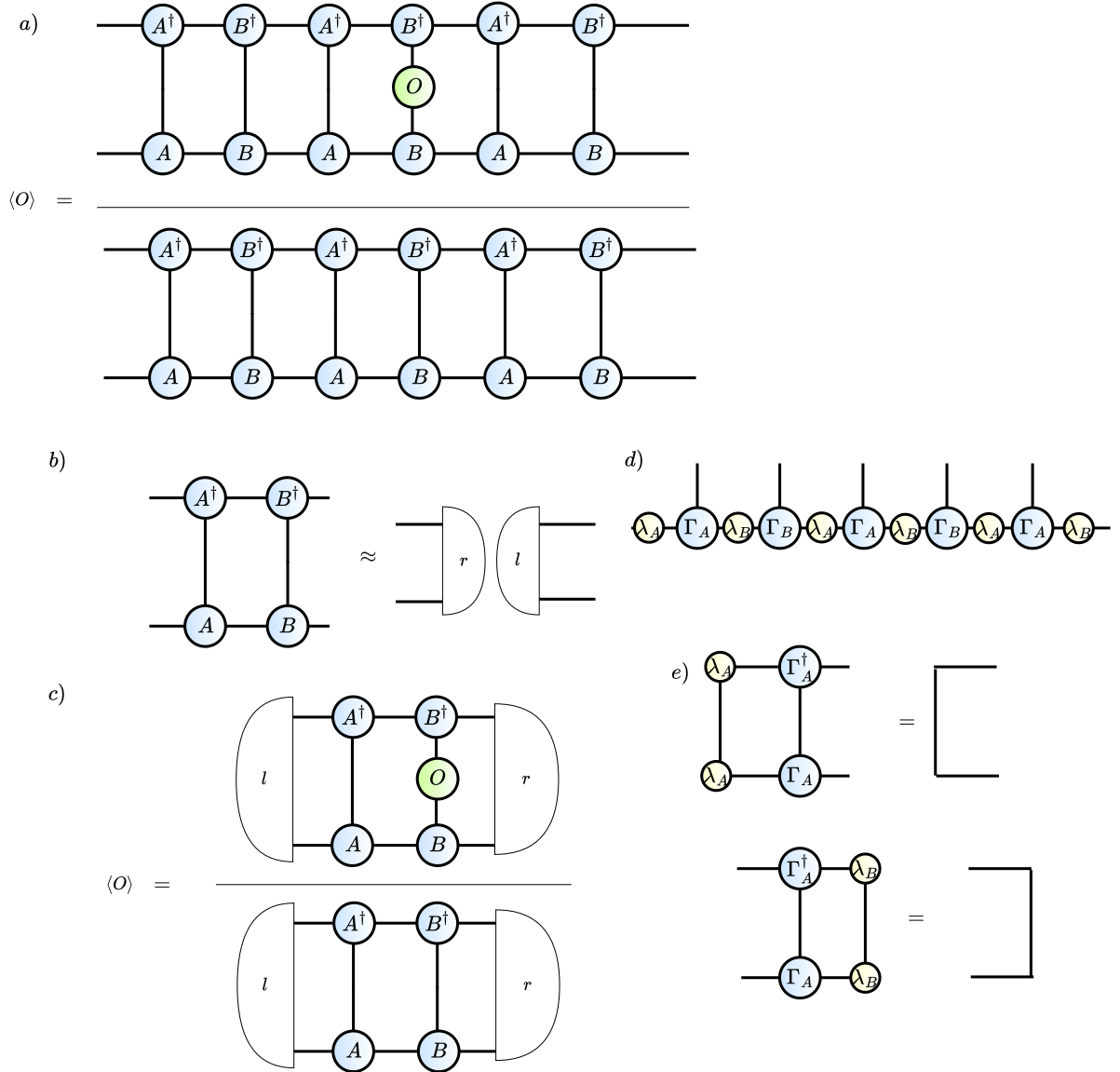


Рис. 2.2: а) Графічне зображення процедури знаходження середнього значення оператора O для нескінченного MPS. б) Матриця трансферу для MPS та її головуючі власні вектори. в) Середні значення оператора через власні вектори матриці трансферу. г) Канонічна форма MPS. е) Додаткові умови на тензори у канонічній формі.

2.5 Оптимізація MPS

Ми вже з'ясували, як знаходити середні значення операторів для MPS. Тепер ми маємо визначити, як саме можливо знайти MPS (або якусь іншу тензорну мережу), яке б представляло або апроксимувало основний стан заданого гамільтоніану. Звичайно, для досить малих систем ми можемо знайти основний стан точно і потім представити його у формі MPS за допомогою ітеративних SVD. Але нас більше цікавить випадок дуже великих систем (насправді – нескінченних), для яких ми не можемо знайти хвильову функцію основного стану точно (за винятком окремих випадків інтегрованих систем [40]). У цьому випадку ми знаємо, що основний стан може бути представлений або апроксимований MPS. Ми можемо спробувати використати варіаційний принцип для знаходження цього MPS. А саме, ми знаємо, що основний стан мінімізує середнє значення гамільтоніану системи. Тому ми можемо спробувати знайти MPS, який би мінімізував енергію, і цей MPS був би найкращою апроксимацією основного стану для заданого D (після цього ми можемо поступово збільшувати D , поки енергія не перестане змінюватись). Такий алгоритм є основою DMRG (density matrix renormalization group) алгоритму [28, 31], який є напевно найпоширенішим методом вивчення одновимірних квантових систем. На жаль, цей алгоритм досить важко узагальнити на двовимірні та тривимірні квантові системи (хоча і існують деякі методи оптимізації PEPS на основі градієнтного пошуку [80]). Тому далі ми будемо використовувати іншу стратегію пошуку оптимальної тензорної мережі – еволюцію в уявному часі [29].

Нехай ми маємо якийсь випадковий стан $|\phi\rangle$. Ми можемо розглянути стан: $|\phi(\beta)\rangle = \exp[-\beta H]|\phi\rangle / \|\exp[-\beta H]|\phi\rangle\|$. Цей стан є результатом еволюції початкового стану на уявний час β (із додатковою нормалізацією кінцевого стану). У ліміті $\beta \rightarrow \infty$, $|\phi(\beta)\rangle \rightarrow |g\rangle$ результатом цієї еволюції є основний стан системи. Низка алгоритмів оптимізації тензорних мереж ґрунтується саме на симуляції еволюції в уявному часі. Для цього спочатку уявний час дискретизують на кроки $d\tau$, а потім діють на випадкову початкову тензорну мережу оператором $\exp[-d\tau H]$. Після дії новий стан нормалізують і порівнюють зі станом на минулому кроці. Процедуру продовжують до збіжності стану. У деяких випадках після цього проводять додаткову оптимізацію зі зменшеним $d\tau$, щоб уникнути можливих похи-

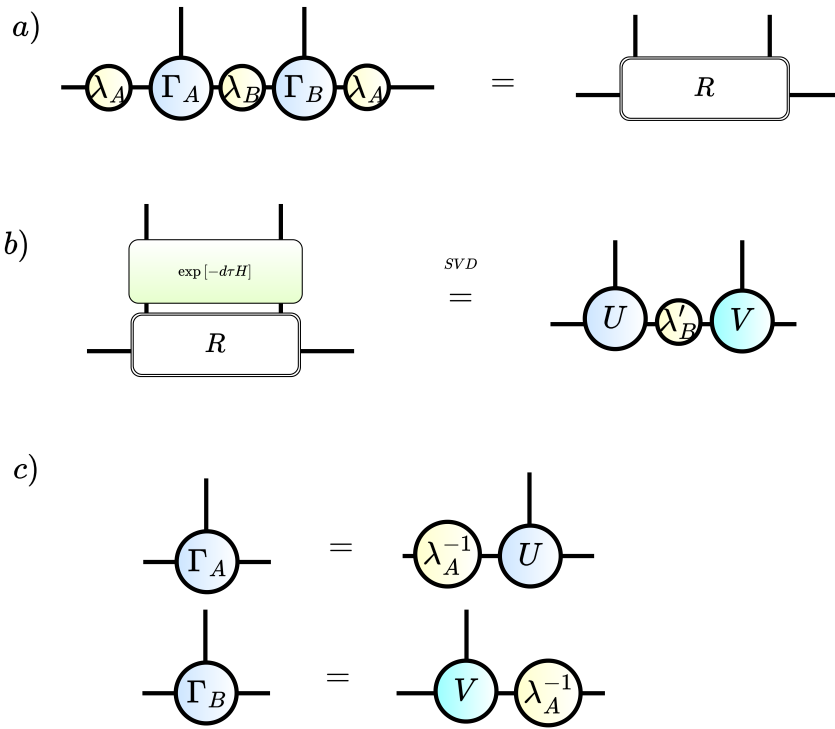


Рис. 2.3: а) Перший крок оптимізації – знаходження тензору R . б) Діємо на R тротерізованою експонентою від гамільтоніана та використовуємо SVD (singular value decomposition) з обрізанням, щоб факторизувати тензор. с) Повертаємось до тензорів Γ .

бок, спричинених дискретизацією.

Найважливіша частина цього алгоритму – це застосування $\exp[-d\tau H]$ до стану представленого тензорною мережею з додатковими індексами розмірності D . На жаль, не має ніяких гарантій, що після такої операції нова хвильова функція буде теж мати форму тензорної мережі із додатковими індексами розмірності D . Насправді, нам потрібно вирішити дві задачі: 1) знайти такий алгоритм застосування $\exp[-d\tau H]$, який би переводив тензорну мережу у іншу тензорну мережу з, можливо, більшою розмірністю $D_2 > D$; 2) розробити процедуру апроксимації мережі із розмірністю D_2 іншою тензорною мережею розмірності D . Від того, як саме вирішуються ці дві задачі залежать точність і час обчислень більшості алгоритмів тензорних мереж, особливо для двовимірних і тривимірних систем.

У цьому підрозділі ми пояснимо тільки найпростішу і найстарішу схему вирішення обох задач і тільки для одновимірних систем – time-evolving block decimation (TEBD) [44]. У подальших розділах ми обговоримо цілу низку узагальнень і доопрацювань. У своїй найпростішій версії TEBD може бути використаний тільки для систем із взаємодіями між найближчими

сусідами: $H = \sum_n h_{n,n+1}$, де оператори $h_{n,n+1}$ діють на вузли $n, n + 1$. До таких систем належать, наприклад, моделі Гейзенберга чи Габбарда. Для представлення оператора еволюції $\exp[-d\tau H]$ використаємо розкладання Троттера–Сузукі. Для цього розділимо гамільтоніан на наступні два доданки: $H = H_A + H_B$, $H_A = \sum_n h_{2n,2n+1}$, $H_B = \sum_n h_{2n+1,2n+2}$. Звернемо увагу, що всі оператори у сумах для H_A і H_B комутують між собою. Тепер ми можемо використати приблизну формулу Троттера–Сузукі:

$$\exp[-d\tau H] \approx \exp[-d\tau H_B] \exp[-d\tau H_A]. \quad (2.2)$$

Ця формула є придатною за малих $d\tau$. Для множника $\exp[-d\tau H_A]$ виконується рівність $\exp[-d\tau H_A] = \prod_n \exp[-d\tau h_{2n,2n+1}]$ (для $\exp[-d\tau H_B]$ формула аналогічна). Тепер нам потрібно подіяти цими операторами (кожен з яких діє тільки на два сусідні вузли) на тензорну мережу. Ця дія представлена на Рис. 2.3(a-b). Ми бачимо, що після дії цих операторів, два тензори Γ для сусідніх спінів об'єднуються у один. Щоб повернутися назад до MPS, нам потрібно факторизувати цей новий тензор четвертого ранга у два нових тензори Γ . Оптимальна факторизація може бути досягнута у два кроки, які зображені на Рис. 2.3(b-c). На першому кроці був використаний SVD алгоритм із обрізанням розмірності спектра S до D (залишаються тільки D найбільших елементів спектра S). Зазначимо, що оптимальність такого вибору обрізання залежить від того, чи знаходиться тензорна мережа постійно у канонічній формі. Насправді, канонічна форма може порушуватись, але для малих $d\tau$, вона не тільки не порушується, але й автоматично виникає, навіть якщо спочатку тензорна мережа не була у канонічній формі. Тому, малий крок дискретизації $d\tau$ виконує одночасно дві цілі: знизити похибку розкладання Троттера–Сузукі і зберегти канонічну форму MPS. У деяких випадках також можливо використовувати алгоритм канонізації MPS, для того щоб гарантувати оптимальні обрізання. Загальна схема TEVD алгоритму полягає в наступному:

1) Створити випадковий початковий MPS з розмірністю додаткових індексів D із певною періодичністю тензорів. Опціонально можна також звести його до канонічної форми.

2) Починаємо крок оптимізації. Подіяти на тензори MPS експонентами із $\exp[-d\tau H_A]$. Використати SVD для оптимального обрізання. Отримати

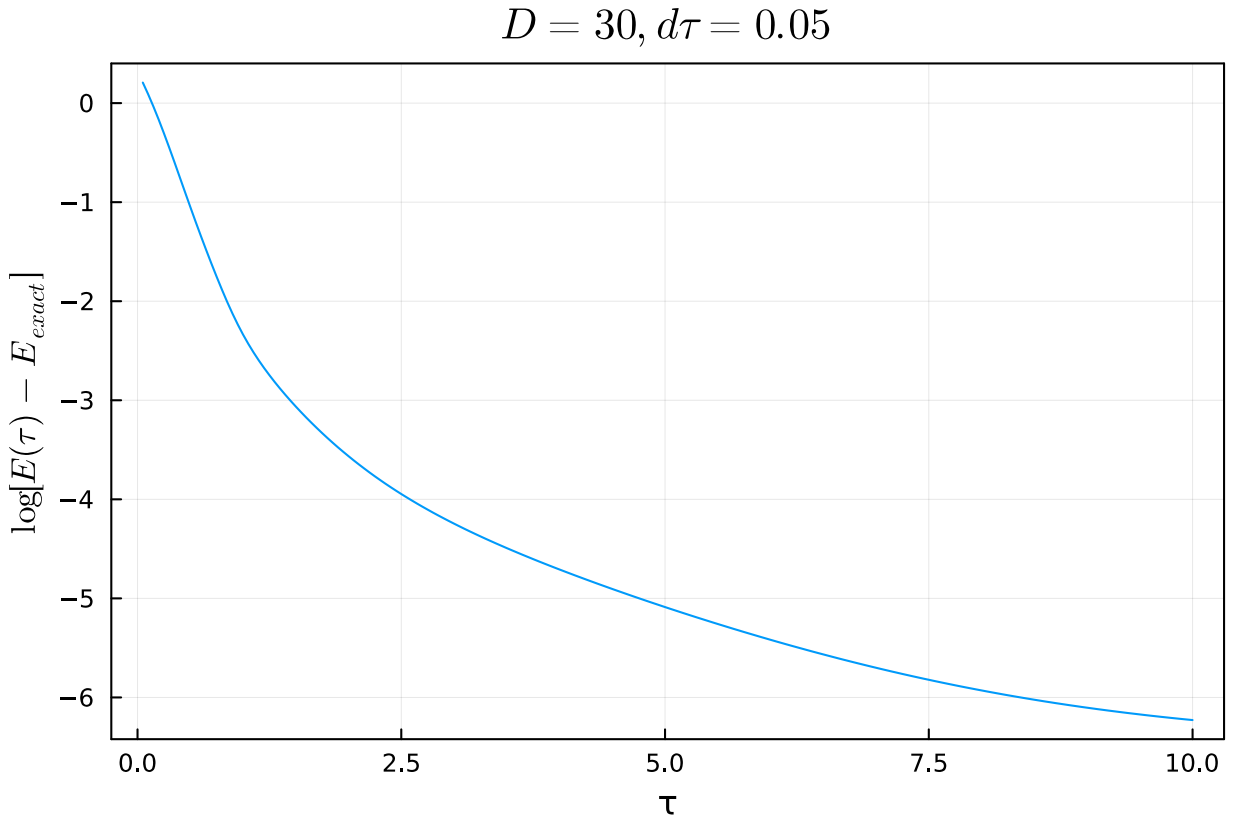


Рис. 2.4: Зміна енергії на вузол решітки із еволюцією в уявному часі порівняно з майже точною енергією E_{exact} із параметрами $d\tau = 0.05$, $D = 30$. Результати узгоджені із точністю в 0.1 відсотка.

нові тензори Γ .

3) Подіяти на MPS експонентами із $\exp[-d\tau H_B]$. Повторити оптимальне обрізання.

4) Нормалізувати усі тензори і порівняти їх з результатом минулого кроку. Якщо збіжності немає, повернутися до кроку 2.

5) Після збіжності можна зменшити крок троттеризації $d\tau$ або збільшити D і повторити обчислення, використовуючи результат попередньої оптимізації в якості початкового MPS.

Протестуємо цей метод на моделі Галдейна. На Рис. 2.4 ми бачимо як зменшується енергія на вузол для досить невеликих параметрів контролю $D = 30$. Енергія добре узгоджується з майже точними результатами з праці [30]. Ми бачимо, що обчислені значення енергії досить швидко зменшуються до енергії основного стану.

2.6 Двовимірні тензорні мережі

Після цього вступу до одновимірних тензорних мереж і їх оптимізації ми можемо переходити до двовимірного випадку. Розглянемо, наприклад, квадратну решітку. PEPS тензорна мережа тоді складається з однакових (або періодичних) тензорів 5-ого рангу Γ_{lrud}^i , де індекс i приймає значення у фізичному гільбертовому просторі вузла квадратної решітки, а l, r, u, d – додаткові індекси розмірності D . Графом тензорної мережі є відповідно квадратна решітка, як показано на Рис. 2.5(a). Додатково, як і у випадку канонічної форми для MPS на усіх ребрах графу розташовані позитивні діагональні матриці λ_b . Як і у випадку одновимірної системи, ми можемо ввести канонічну, або суперортогональну форму тензорної мережі [139, 151]. Ця канонічна форма накладає додаткові умови на тензори Γ , λ_b , які показані на Рис. 2.5(b). На Рис. 2.5(c) також зображений алгоритм суперортогоналізації, який дозволяє перевести будь-який початковий PEPS до канонічної форми завдяки ітеративним калібрувальним перетворенням [151, 152]. Звернемо увагу, що ці перетворення не змінюють хвильову функцію в цілому, а тільки змінює тензори Γ і λ_b .

Зробимо декілька зауважень щодо зазначеної суперортогональної канонічної форми. Якщо у випадку MPS, канонічна форма дозволяла точно знайти середні значення операторів, то для двовимірної (або тривимірної) тензорної мережі канонічна форма дозволяє знайти середні значення операторів тільки наближено (хоча наближення і працює досить добре для систем із щільною у спектрі елементарних збуджень [77]). Обчислення середніх значень операторів у загальному випадку буде представлено у наступному підрозділі. Проте, канонічна форма все ж таки може бути використана у алгоритмах для двовимірних і тривимірних тензорних мереж як метод трункації хвильової функції під час еволюції в уявному часі. Алгоритм трункації на основі канонічної форми (який також називають Simple Update, SU [34, 76]) є досить дешевим, і має масштабування складності тільки як D^5 (на квадратній решітці, а для кубічної решітки – D^7). З іншого боку, цей алгоритм не є оптимальним (він є оптимальним тільки для одновимірних тензорних мереж, або тензорних мереж на графі типу дерево). Тому цей алгоритм не приводить до найточніших результатів для заданого D , хоча і може бути дуже близько до них у випадку систем із

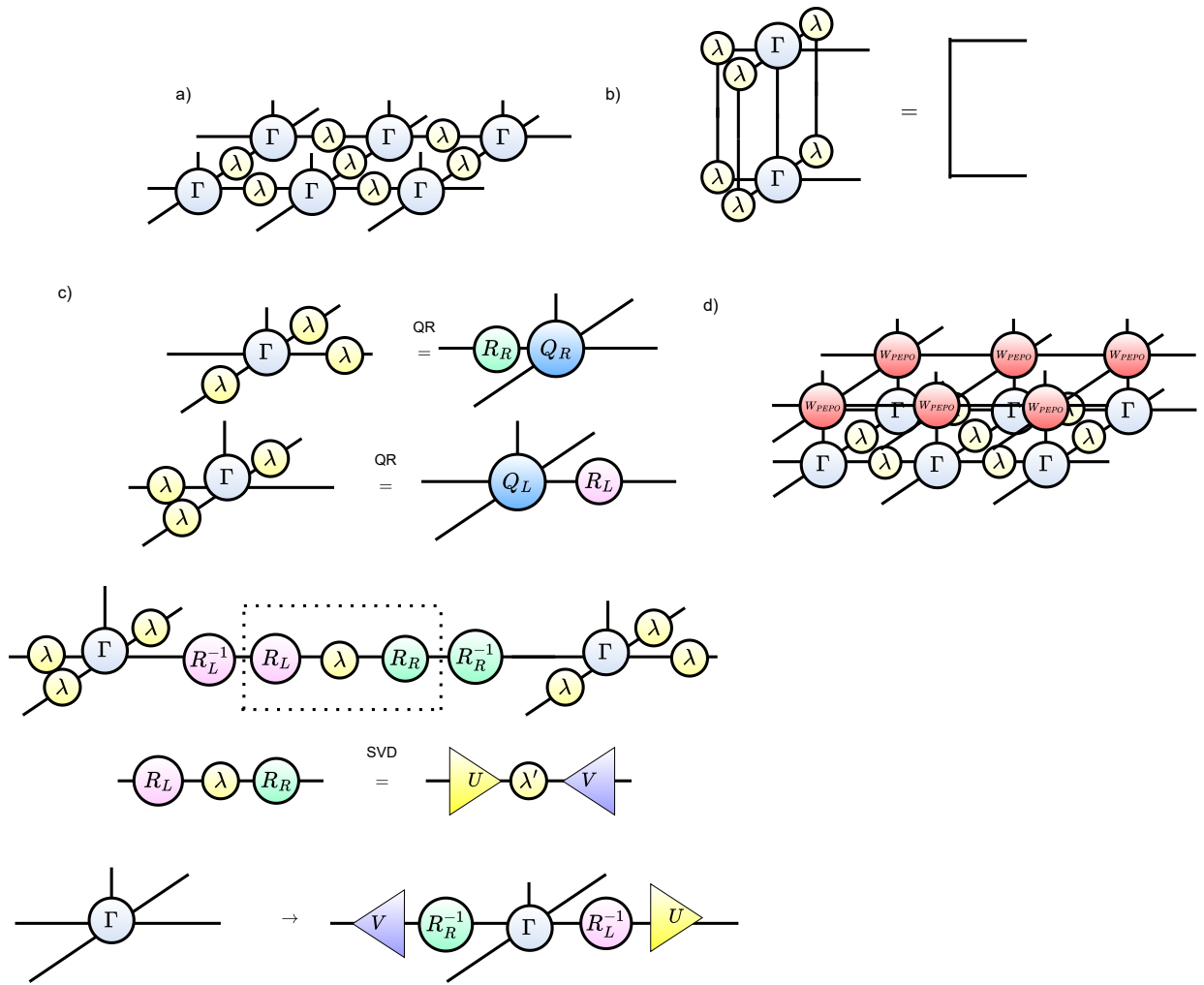


Рис. 2.5: а) PEPS у канонічній формі. б) Додаткові умови на тензори PEPS у канонічній формі. в) Ітерація алгоритму приведення PEPS до канонічної форми. Такі ітерації повторюються для всіх ребер решітки до збіжності. д) Аплікація PEPO до PEPS.

щілиною у спектрі. Для більш точної оптимізації, яка б проводила оптимальну трункацію, слід використовувати інший алгоритм – Full Update [78], або ж варіаційну оптимізацію з градієнтним пошуком [80]. Недоліком Full Update є його складність, яка відповідає $D^{10} - D^{12}$ на квадратній решітці (Full Update все ще не розроблений на тривимірних ґратках). Зауважимо, що існують ще й інші алгоритми, такі як кластерний підхід [153], які за складністю можна поставити між SU та Full Update.

Пояснимо тепер, як суперортогональну канонічну форму можливо використовувати для усікання. Нехай ϵ хвильова функція із додатковими індексами розмірності D_2 . Ми маємо на меті апроксимувати цю тензорну мережу іншою, з додатковими індексами розмірності D , $D < D_2$. За допомогою канонічної форми це можна зробити наступним чином: перевести

початковий PEPS у канонічну форму, відсортувати матриці λ_b у порядку зменшення і викинути $(D_2 - D)$ найменших діагональних значень матриці λ_b . Така тензорна мережа в результаті буде мати додаткові індекси розмірності D .

Приведемо більш детальний опис процедури SU. По-перше, нам потрібно знайти спосіб як подіяти експонентою від гамільтоніану на стан, представлений двовимірною тензорною мережею. Є декілька методів, як це можна зробити. Найпоширеніший спосіб є аналогом TEBD алгоритму для одновимірних тензорних мереж: використовує троттерізацію гамільтоніану й діє на тензорну мережами операторами із підтримкою тільки на двох сусідніх вузлах. Обрізання в такому методі виконується знову за допомогою SVD. Одним із недоліків цієї схеми є збільшена елементарна комірка ґратки: так, два сусідні вузли мають бути завжди представлені різними тензорами, тому цей алгоритм не може працювати із тензорними мережами із однаковими тензорами на усіх вузлах (що є мінімальною коміркою). Альтернативний варіант ґрунтується на апроксимації експоненти від гамільтоніану оператором спроектованих заплутаних пар (PEPO), із додатковими індексами розмірності χ , як показано на Рис. 2.5(e). Оператор у формі PEPO може діяти безпосередньо на PEPS і переводить його у інший PEPS із додатковими індексами розмірності χD . На наступному кроці нам потрібно повернути розмірності додаткових індексів до D : це можна зробити за допомогою обрізання з суперортогональною канонічною формою, яка була описана вище. Процедура повторюється до збіжності усіх тензорів PEPS.

2.7 Обчислення операторів й енергії

Обчислення середніх значень операторів для двовимірних систем набагато складніше ніж для MPS. Спочатку ми можемо записати середнє значення операторів як дворівневу нескінченну тензорну мережу, зображену на Рис. 2.6(a-b). У цій тензорній мережі додатково поглинули матриці λ_b у сусідні тензори Γ , як зображено на Рис. 2.6(a). Нам тепер необхідно згорнути цю нескінченну тензорну мережу. Для MPS (для яких ми теж отримували дворівневу нескінченну тензорну мережу на Рис. 2.2(a)) ми знайшли точний алгоритм обчислення середніх значень за допомогою канонічної форми або діагоналізації трансфер-матриці. На жаль, для двовимірних систем,

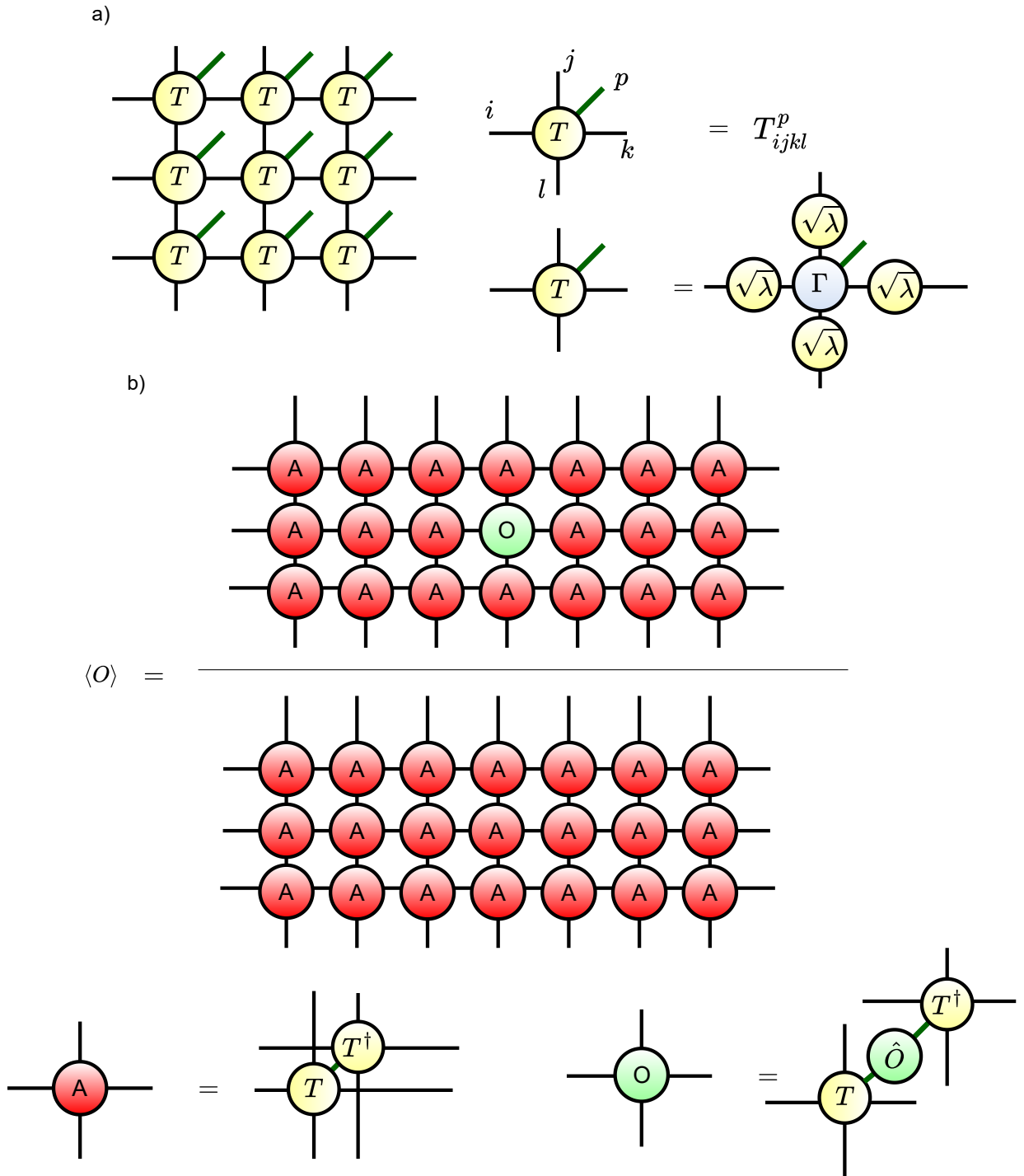


Рис. 2.6: а) Включення λ_b до тензорів Γ б) Знаходження середнього значення оператора O , як відношення двох згортки нескінченних тензорних мереж. Кожен тензор нескінченної мережі складається із згортки двох рівнів тензорів T (із можливою вставкою додаткового оператора O на фізичному індексі).

канонічна форма вже не дозволяє знаходити точне значення середніх від операторів, а трансфер-матриця вже не є скінченновимірною (тому її точна діагоналізація більш неможлива, хоча й існують інтегровані системи, для яких діагоналізація все ж таки можлива завдяки алгебраїчним структурам симетрій). Тому в загальному випадку точна згортка цієї мережі неможлива і ми маємо використовувати контрольовані апроксимаційні схеми, результати яких ми б могли екстраполювати до точних значень.

На практиці використовують декілька різних методів наближеної згортки. Перший метод заснований на пошуку власних векторів трансфер-матриці у вигляді MPS [78]. Звичайно, це буде тільки апроксимація справжнього головуючого власного вектора трансфер-матриці, але збільшуючи розмірність додаткових індексів цього MPS результати можна екстраполювати до точних. Другий метод ґрунтується на тензорній ренормалізаційній групі [84]. Ідея цього методу – згорнути декілька сусідніх тензорів у один більш великий, але так, що структура решітки переходить сама у себе, але у меншому масштабі. Третій варіант використовує Монте-Карло алгоритми для генерації вірогідних зразків для даної тензорної мережі. Нас буде більш цікавити четвертий варіант, який ґрунтується на кутовій матриці переносу (corner transfer matrix, CTM) [38, 89], запропонованій Бакстером. У наступному підрозділі ми дамо приклад найпростішого алгоритму заснованого на кутовій матриці переносу, а потім перейдемо до більш складних варіацій.

2.8 CTMRG. Частина 1.

Розглянемо тензорну мережу, що зображена на Рис. 2.6(a). Зробимо також кілька додаткових припущень про тензори A – вони мають бути симетричними відносно обертань і віддзеркалень. Такі тензори виникають, наприклад, у класичній моделі Ізінга. У цьому розділі ми будемо використовувати як приклад саме класичну модель Ізінга. Нагадаємо, що ця модель може бути сформульована наступним чином: на кожному вузлі ґратки знаходиться класичний спін s_i , який може приймати значення ± 1 . Енергія цієї системи є сумою за усіма парами сусідів: $E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$. Вирішити модель Ізінга – обчислити її статистичну суму $Z(\beta) = \sum_s \exp[-\beta E(s)]$, а також середні значення спостережуваних, таких як $\langle s_i \rangle = \sum_s s_i e^{-\beta E(s)} / Z(\beta)$. У статті [93] описано як задачу вирішення моделі Ізінга можна звести до

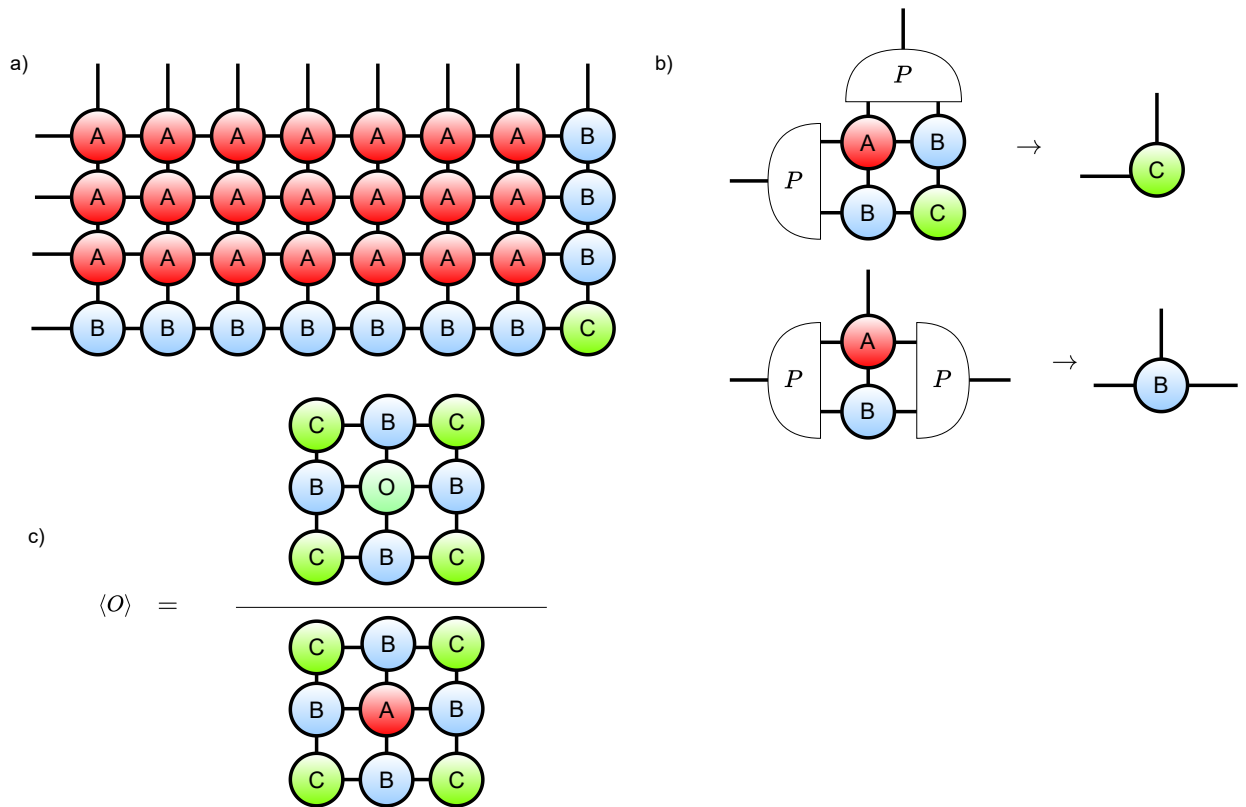


Рис. 2.7: а) Згортку частини нескінченної тензорної мережі із тензорів A можна представити із граничних тензорів третього рангу B і кутових матриць C . б) Ці тензори й матриці мають бути фіксованими точками ітерацій із проекторами P . Проектори можна знайти із розкладу збільшеної матриці C на її власні вектори, та проєктуючи на χ векторів із найбільшими власними значеннями. в) Середнє значення оператора O із Рис. 2.6(а) за допомогою СТМ.

задачі згортки нескінченної тензорної мережі. Тензори цієї мережі відповідають додатковим умовам симетрії вище.

Почнемо вводити кутову матрицю трансферу. Для цього представимо, що ми вже згорнули частину тензорної мережі, як показано на Рис. 2.7. При згортці ми отримуємо нові граничні тензори B (ми досить часто будемо також позначати ці тензори як T), а також кутові матриці C . З огляду на симетрію задачі усі кути й рядки однакові (й відповідно однакові тензори B і C). Разом ці тензори утворюють СТМ.

Для практичного пошуку СТМ тензорів використовують ітеративний алгоритм – групу перенормування кутової трансфер-матриці (corner transfer matrix renormalization group, СТМРГ) [87, 88]. Ідея СТМРГ полягає у тому, що якщо граничні тензори B й кутова матриця C поглине ще один рядок та стовпець тензорів A , то тензори СТМ не мають змінитися. Тобто

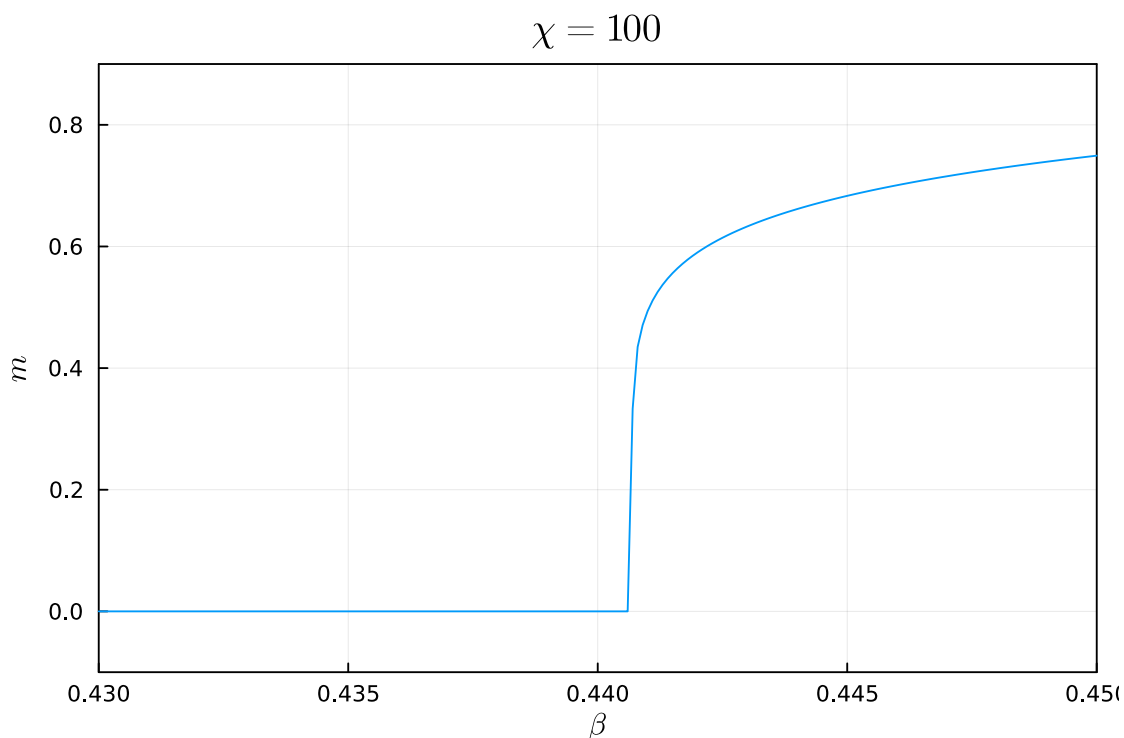


Рис. 2.8: Поведінка намагніченості m у моделі Ізінга на квадратній решітці в залежності від зворотної температури β . Критичне значення $\beta_c = \log(1 + \sqrt{2})/2 \approx 0.44068$. Результати отримані СТМРГ алгоритмом з розмірністю додаткових індексів $\chi = 100$.

тензори СТМ мають бути фіксованою точкою певних ітерацій поглинання тензорів A . Але на кожному кроці ітерації розмірність кутової матриці буде зростати. Тому, після кроку зростання ми маємо знайти усікання кутової матриці назад до фіксованої розмірності χ . Це усікання виконується завдяки діагоналізації кутової матриці і викиданню усіх власних векторів, крім χ найбільших за власним значенням. Одночасно з цим ми маємо збільшити і рядок B , який відповідає тензору рядка рангу 3, як показано на Рис. 2.7(b). У результаті таких послідовних зростань і усікань ми отримуємо нові кутову матрицю переносу і граничний тензор B . Ми можемо повторювати цю ітерацію до збіжності кутової матриці і граничного тензору. Як показано на Рис. 2.7(c), після збіжності отримані матриці і тензори можуть бути використані для знаходження намагніченості або енергії в моделі Ізінга (див. Рис. 2.8).

Зробимо декілька зауважень щодо СТМРГ алгоритму. Звичайно, цей метод є тільки наближеним способом згортки тензорної мережі. Основним параметром, який контролює точність апроксимації є розмірність χ . То-

му для перевірки збіжності результатів можна поступово змінювати χ і перевіряти залежність фізичних величин від цієї розмірності. У більшості випадків $\chi \lesssim 100 - 200$ є достатнім, щоб отримати дуже точні результати.

2.9 CTMRG. Частина 2.

Розглянемо тепер більш складний випадок, коли елементарна комірка тензорної мережі складається із більше ніж одного тензора, і ці тензори не обмежені симетріями. Такий випадок із елементарною коміркою із двох тензорів у шаховому порядку зображений на Рис. 2.9(a). Для цього випадку вже неможливо використати однакові й симетричні кутові матриці й тензори рядків. Ми маємо ввести для кожного із тензорів елементарної комірки 4 кутових матриці й 4 різних тензора рядку. Нова конструкція СТМ має набагато більше необхідних тензорів, і їх правила оновлення теж стають складнішими.

Правила оновлення графічно зображені на Рис. 2.9(b). Зробимо тут декілька пояснювальних зауважень. Нашим найпершим завданням буде знайти проектори, які дозволять обрізати зростаючу розмірність кутових матриць й тензорів рядків. Для цього ми спочатку знаходимо матриці C_L, C_R , як зображено на Рис. 2.9(c). З цих матриць ми можемо знайти проектори за допомогою процедури біртогоналізації, яка теж зображена на Рис. 2.9(c) [63]. Після знаходження проекторів ми можемо використати їх для обрізання збільшених кутових матриць й тензорів рядків, як зображено на Рис. 2.9(b). Ця процедура повторюється поки усі тензори рядків із одного із напрямів послідовно не оновляться [34]. Після цього те ж саме повторюють для іншого напрямку, наприклад, зверху. Вся процедура повторюється до збіжності якихось параметрів, наприклад, зведених матриць густини для сусідніх вузлів тензорної мережі.

Розглянемо тепер пропорційність часу обчислень до параметрів тензорної мережі та кутових матриць. Тензорна мережа характеризується розмірністю $d = D^2$ її індексів, а кутові матриці – розмірністю χ додаткових індексів. Найскладніша частина алгоритму – обчислення матриць C_L, C_R , час якої має асимптотичну формулу $d^3\chi^3$. Такий саме час має і процедура SVD під час біртогоналізації цих матриць. Насправді, цей час можливо трохи зменшити, якщо використовувати рандомізований SVD, без явної конструкції матриць C_L і C_R . Це дозволяє зменшити час обчислень

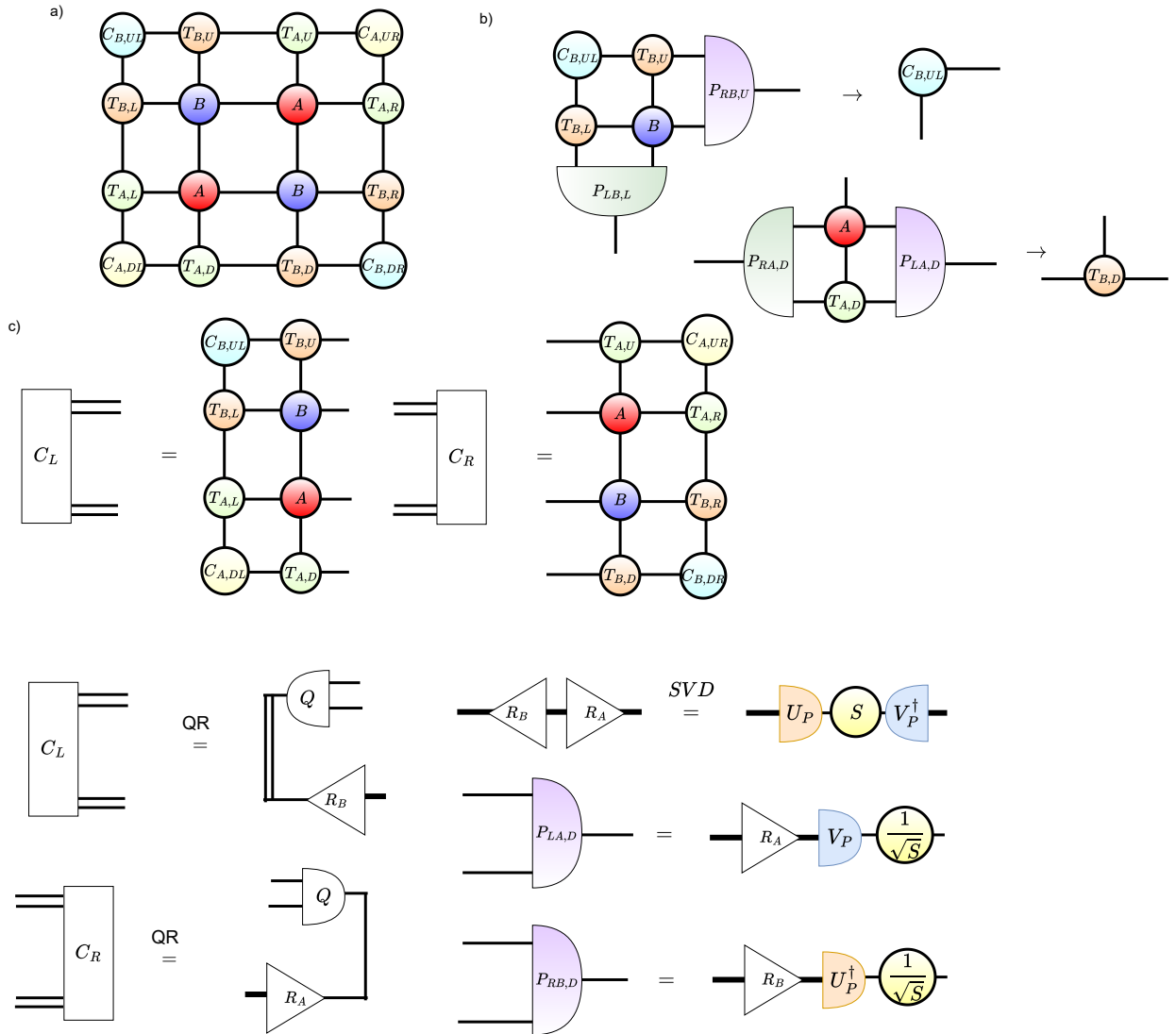


Рис. 2.9: а) СТМ тензори для тензорної мережі із двох різних тензорів A, B у шаховому порядку. Оскільки тензори анізотропні, потрібні 8 різних тензорів рядків та стовпців T та 8 різних кутових матриць. б) Правила оновлення для тензорів T, C схожі на найпростіший випадок із попереднього розділу, але включає різні проєктори для різних індексів, і може переводити, наприклад, тензори рядків T_A до тензорів T_B . в) Знаходження проєкторів є досить складним і використовує процедуру біортогоналізації тензорів C_L, C_R . Біортогоналізація графічно зображена на рисунку.

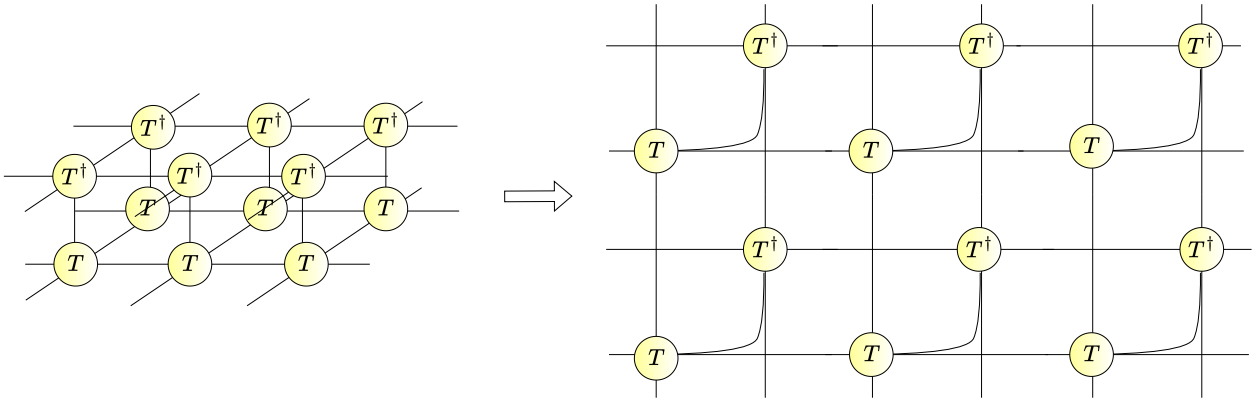


Рис. 2.10: Відображення тензорної мережі з дворівневих тензорів у однорівневу тензорну мережу із більшою елементарною коміркою (2×2) та додатковими тензорами (тензори у формі хреста – просто добутки тензорів Кронекера).

до $\chi^3 d^2 = \chi^3 D^4 \propto D^{10}$, де було використано емпіричне правило, що для збіжності алгоритму за χ необхідно $\chi \propto D^2$. Така складність схеми обчислень дозволяє практично досягти для двовимірних тензорних мереж $D \approx 15 - 16$. У наступному підрозділі описана ще одна схема CTMRG, яка дозволяє знизити час алгоритму до D^8 завдяки ефективному використанню багаторівневого представлення тензорів мережі.

2.10 CTMRG. Частина 3

Елементарний тензор у попередньому підрозділі складався із двох тензорів хвильової функції PEPS – тензору T_{ludr}^p та його комплексного спряження T^\dagger , як зображено на Рис. 2.6(b). Такий елементарний тензор має розмірність об'єднаних індексів D^2 , хоча елементарні тензори хвильової функції мали розмірність додаткових індексів лише D . Ідея багаторівневого проектування [94, 95] – перетворити дворівневу тензорну мережу із розмірністю індексів D^2 на однорівневу тензорну мережу із розмірністю індексів D , та збільшеною елементарною коміркою, як зображено на Рис. 2.10. Тут введено додаткові тензори, які складаються з добутку символів Кронекера. Ці додаткові тензори забезпечують правильну згортку різних індексів між собою. Нова тензорна мережа має у 4 рази більше тензорів у елементарній комірці, але усі розмірності індексів пропорційні до першого ступеню D . Завдяки цьому складність алгоритму зменшується до $\chi^3 d^2 = \chi^3 D^2 \approx D^8$ (де знов $\chi \propto D^2$). Така складність дає змогу досягти для двовимірних тензорних мереж $D = 25$ у оптимізації із простим оновленням.

РОЗДІЛ 3

Тривимірні тензорні мережі

У цьому розділі нас цікавлять хвильові функції основного стану тривимірних систем на простій кубічній ґратці. Ми моделюємо хвильову функцію як тензорну мережу типу iPEPS: розміщаємо тензори 7-го рангу T_{lrupio}^p на всіх вузлах ґратки та додатні матриці λ_{lr} на всіх зв'язках ґратки. Індекс p відповідає фізичному гільбертовому простору, а l, r, u, d, i, o – віртуальним індексам (ліворуч, праворуч, вгору, вниз та вперед, назад). Для отримання хвильової функції iPEPS всі віртуальні індекси мають бути згорнуті відповідно до геометрії решітки.

Зробимо деякі додаткові припущення щодо тензорів T : по-перше, вважатимемо, що тензори однакові для всіх ділянок ґратки. Отже, хвильова функція буде трансляційно інваріантною. Припущення про трансляційну інваріантність може бути порушене в деяких моделях, для яких конструкція в цій роботі має бути належним чином узагальнена. По-друге, будемо вважати, що тензори мають деяку симетрію дзеркальних відображень, наприклад, при перестановці лівих і правих індексів: $T_{lrudio}^p = T_{rludio}^p = T_{lrduio}^p = T_{lrudoi}^p$. Ці симетрії дзеркального відбиття гарантують ермітовість матриці переносу хвильової функції iPEPS.

Перейдемо тепер до опису алгоритму оптимізації тривимірних тензорних мереж. Алгоритм оптимізації засновано на тих самих принципах, що й оптимізації двовимірних тензорних мереж.

3.1 Оптимізація тривимірного iPEPS

Ми провели оптимізацію iPEPS за допомогою простого оновлення з PEPO, що апроксимує оператор $\exp(-Hdt)$. Ми не використовували найпоширеніший підхід, заснований на застосуванні гейтів Троттера, оскільки він вимагає збільшеної комірки і порушує симетрії обертання та відбиття (принаймні, під час оптимізації). Замість цього можна використати еволюцію на основі PEPO з елементарною коміркою $1 \times 1 \times 1$, а після кожного застосування PEPO виконувати явні тензорні симетризації. Це дає змогу отримати тензори iPEPS з симетріями відбиття і мінімальною елементарною коміркою, що значно спрощує обчислення середніх значень від операторів.

Оптимізація на основі PEPO виконується в декілька кроків. По-перше, ми повинні ініціалізувати хвильову функцію iPEPS. Ми використали тензори з $D = 1$ як початкову iPEPS, оскільки помітили, що така ініціалізація прискорює збіжність. По-друге, ми повинні знайти PEPO, яка апроксимує оператор $\exp(-Hdt)$. Це можна зробити, наприклад, за допомогою W^{II} -методу або деяких кластерних методів [154]. Потім ми багаторазово застосовуємо PEPO до хвильової функції iPEPS, як показано на Рис. 3.1(b). Розмірність зв'язку D зростає з кожним застосуванням PEPO. Отже, після кількох перших застосувань ми повинні почати усікати розмірність зв'язку iPEPS до деякої фіксованої цільової розмірності зв'язку D . Усікання можна виконати за допомогою суперортогональної канонічної форми [139, 151, 152], яка визначається умовою на Рис. 3.2(b). Для усікання розмірності зв'язків iPEPS спочатку слід ітеративно перетворити її до канонічної форми, як показано на Рис. 3.2(c), а потім відсікти зв'язки відповідно до величин λ діагональних елементів (відсікаємо найменші діагональні елементи). Зауважимо, що в суперортогональній канонічній формі λ є діагональними і додатними.

Повторюючи ці застосування PEPO, ітерації канонічної форми та усікання, ми наближаємо хвильову функцію iPEPS до істинного основного стану. Збіжність можна відстежувати за допомогою матриць λ або спостережень, обчислених за схемою простого оновлення. Ми помітили, що отримані тензори є симетричними при відбиттях з дуже високою точністю (норма несиметричної частини має порядок 10^{-12}).

3.2 Знаходження середніх: граничний PEPS

Алгоритм оптимізації тривимірного iPEPS з попереднього підрозділу є досить простим і швидким. Так його обчислювальна складність зростає лише як D^7 . У більшості наших обчислень оптимізація займала досить малу частину повного часу обчислень.

Набагато складнішою задачею є обчислення середніх від операторів для тривимірних тензорних мереж. Існує декілька можливих стратегій: перша, запропонована в праці [77], використовує наближене обчислення середніх за допомогою простого оновлення. На жаль, такий алгоритм є досить точним лише для систем із слабкою кореляцією і щільною у спектрі. Для справжніх сильно-корельованих систем апроксимація простого оновлення

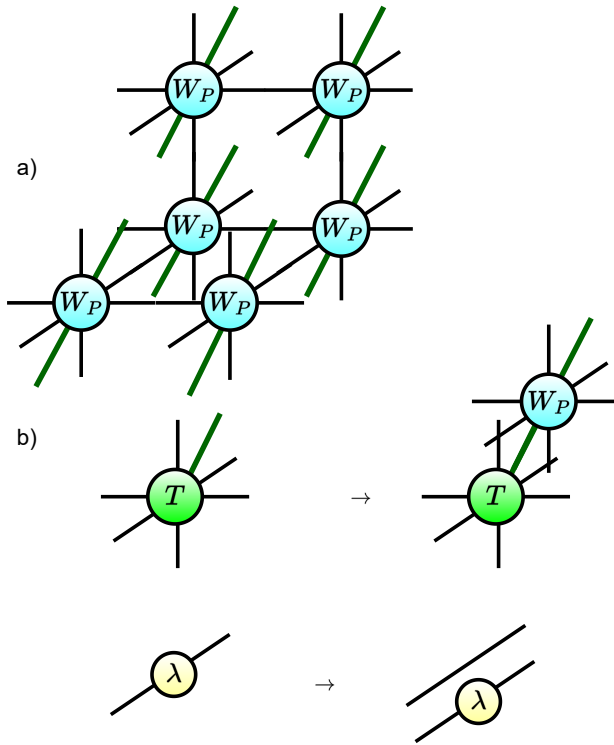


Рис. 3.1: а) Графічна ілюстрація 3d PEPO, що складається з окремих тензорів W_P . Тензори вибрано так, щоб наближено дорівнювати $\exp(-Hdt)$. б) Дія PEPO на окремі тензори T 3d iPEPS. Це призводить до збільшеної розмірності зв'язку, яка є добутком розмірностей зв'язку iPEPS і PEPO.

буде давати значну похибку для усіх середніх значень. Друга стратегія [36] використовує для обчислення середніх варіант тензорної групи ренормалізації. Останнім часом з'явилися нові методи тензорної ренормалізаційної групи, які можуть бути застосовані до проблем тривимірних тензорних мереж, але ми не розглядаємо ці методи у цій праці (потрібно зауважити, що на їх сучасному рівні розвитку, тензорні групи ренормалізації у 3d мають проблеми із флуктуаціями помилок і потребують додаткового удосконалення для надійного використання). Третя стратегія була запропонована у праці [35] і була вдосконалена у цій роботі. Ця стратегія використовує метод матриці трансферу для знаходження граничного PEPS, що зводить задачу знаходження середніх до двовимірної проблеми. Ця двовимірна тензорна мережа потім скорочується за допомогою двовимірного CTMRG. Така стратегія у своєму початковому вигляді мала досить значну обчислювальну складність, і оригінальна робота містить розрахунки тільки до $D = 4$ із додатковим використанням симетрії.

Після того, як ми оптимізували iPEPS або за допомогою підходу PEPO,

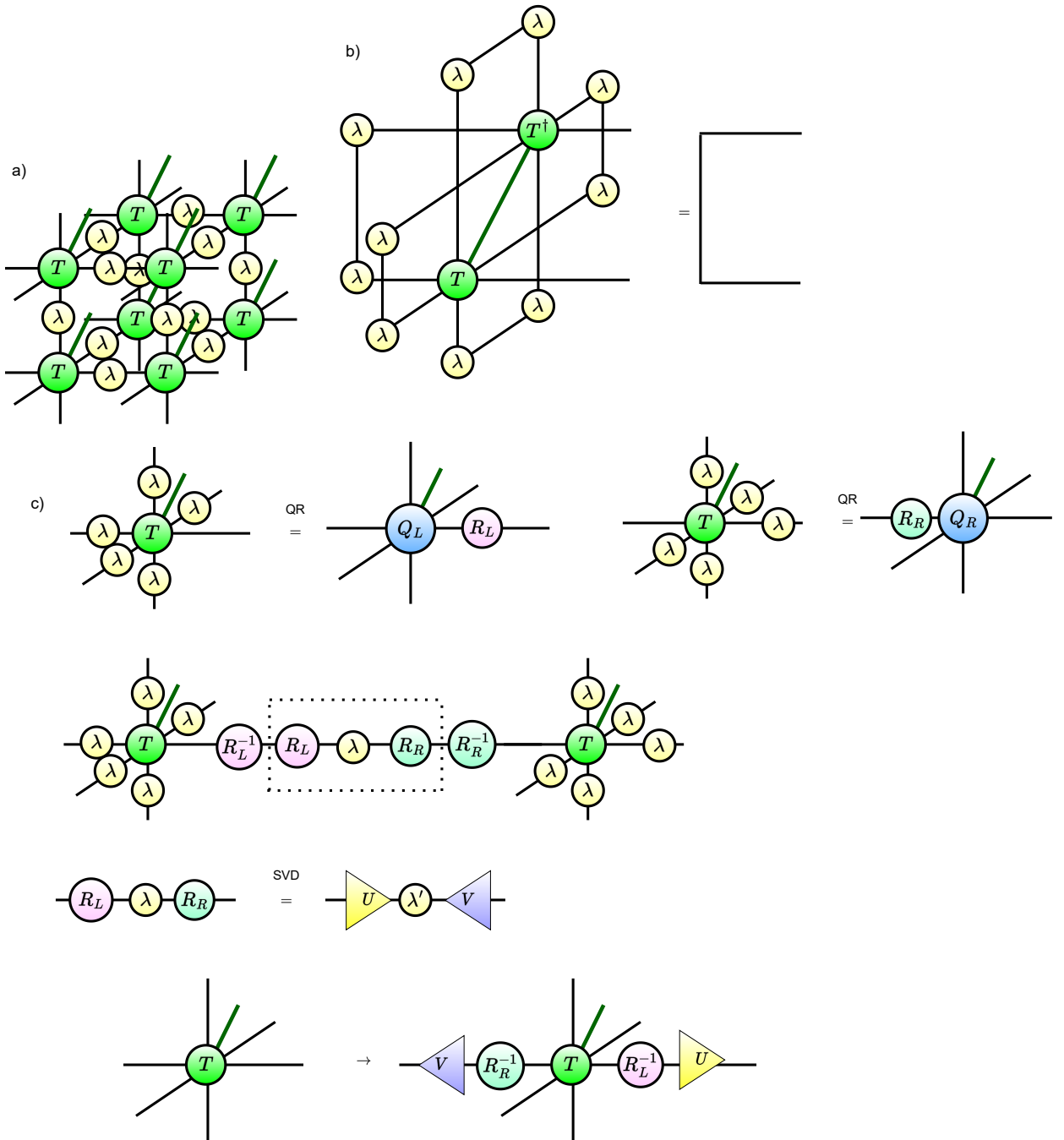


Рис. 3.2: а) Хвильова функція 3d iPEPS, що складається з тензорів T та додатних матриць зв'язку λ . б) Умова суперортогональної канонічної форми, де права частина графічного рівняння є ідентичною матрицею. в) Ітераційна схема суперортогоналізації iPEPS [139, 151]. Фіксованою точкою ітерації є тензори iPEPS у канонічній формі, які можуть бути використані для відсікання зв'язків відповідно до ваг u та λ .

або за допомогою троттеризованих воріт, ми повинні обчислити спостережувані величини з цією хвильовою функцією iPEPS. Для цього треба знайти спосіб обчислення норми хвильової функції $\langle \Psi | \Psi \rangle$ та локальних операторних вставок $\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$, де \hat{O} – локальний оператор. Норму хвильової функції можна подати у вигляді скорочення нескінченної тривимірної тензорної мережі, яка складається з двошарових тензорів $A = T_{lrud}^p \bar{T}_{l_2 r_2 u_2 d_2 i_2 o_2}^p$, де пари індексів типу l і l_2 об'єднано в двошаровий індекс. Цей двошаровий індекс має розмірність D^2 (зверніть увагу, що ми поглинули матриці зв'язків у тензори T). Для скорочення такої мережі можна використати метод матриць переносу: спочатку запишемо скорочення тензорної мережі у вигляді $\langle \Psi | \Psi \rangle = \text{Tr}(M^N)$, де M – площинна трансфер-матриця, яка складається з двошарових тензорів A на нескінченній площині з скороченням усіх індексів у площині, а всі індекси, перпендикулярні до площини, вважаються індексами матриці. Тепер обчислимо лівий та правий головні власні вектори матриці переносу M : $\langle l | M = \lambda \langle l |$ і $M | r \rangle = \lambda | r \rangle$. У випадку нескінченної ґратки цього достатньо, щоб обчислити норму хвильової функції та всі операторні середні. Для моделей, що розглядаються в цій роботі, матриця переносу M , як правило, симетрична, а лівий і правий провідні власні вектори однакові. Проте всі наведені нижче обчислення працюватимуть і для несиметричної матриці переносу M за умови, що всі обчислення слід повторити для обох векторів $\langle l |$ і $| r \rangle$.

Для знаходження головних власних векторів M скористаємось пропозицією з роботи [35] і апроксимуємо ці головні власні вектори як двовимірні iPEPS з розмірністю зв'язку χ_b , в яких роль фізичного індексу замінено на комбінований індекс двошарового тензора A в напрямку, перпендикулярному до площини матриці перенесення (наприклад, якщо шари матриці перенесення лежать у площині xy , то індекси i, o є поперечними, а фізичні індекси тензорів $\langle l |$ iPEPS – l, l_2 , тоді як фізичні індекси правого власного вектора $| r \rangle$ iPEPS – o, o_2). Загалом, граничний $\langle l |$ iPEPS складається з тензорів 6-го рангу $B_{lrud}^{ii_2}$, де i, i_2 мають розмірність D (з тензорів T тривимірного iPEPS), а l, r, u, d – допоміжні індекси розмірності χ_b . Зауважимо, що у випадку укрупненої комірки об'ємного 3d iPEPS граничні тензори B також слід брати з деякою укрупненою коміркою, яка є проекцією 3d комірки на граничну площину.

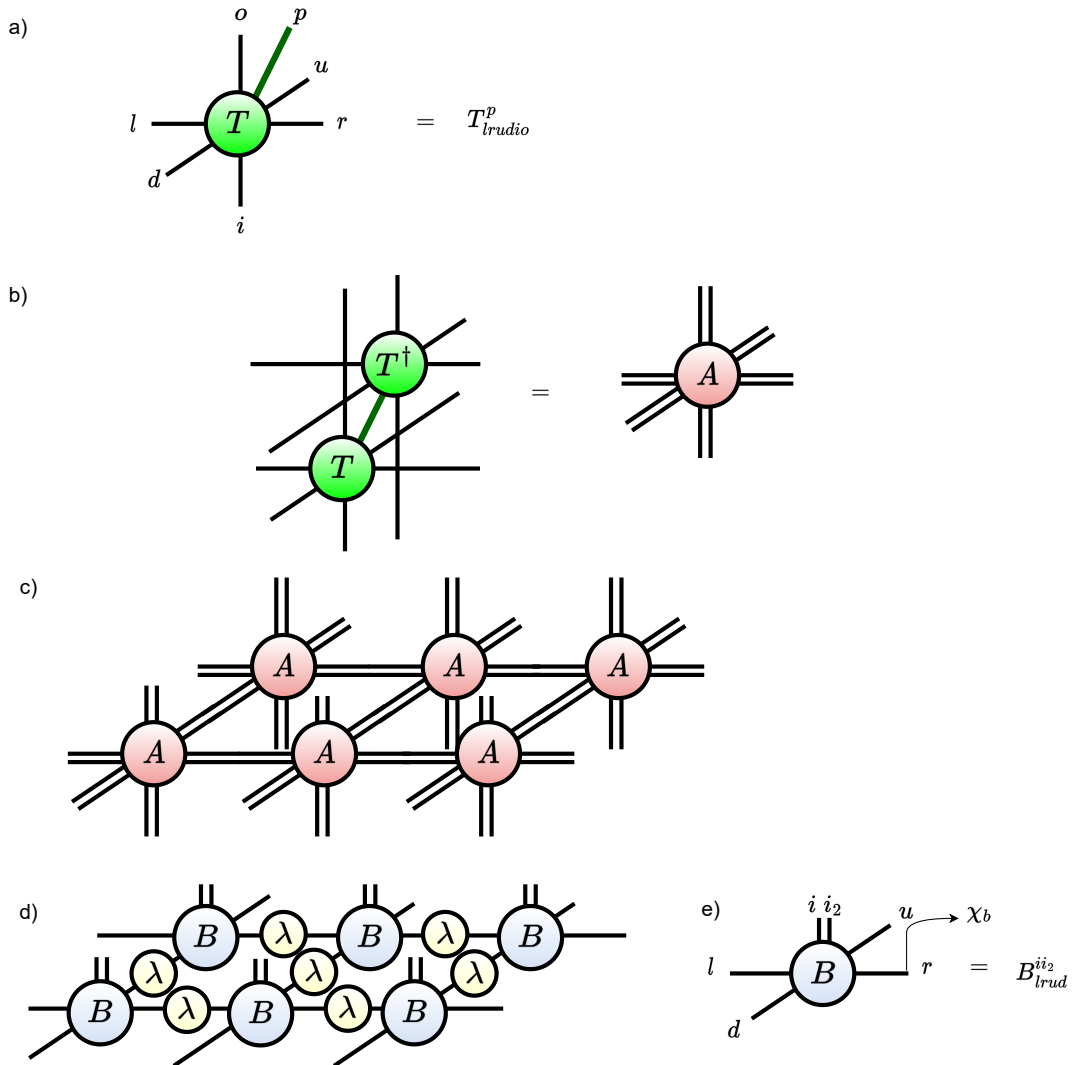


Рис. 3.3: а) Графічна ілюстрація тривимірного об'ємного тензора іPEPS T ; б) Для знаходження норми хвильової функції ми повинні стиснути нескінченну тривимірну тензорну мережу, складену з двохарових тензорів A ; с) Визначення матриці переносу M (складеної з тензорів A на площині) та її провідного власного значення bPEPS $\langle l |$. bPEPS складається з однакових тензорів B з розмірністю віртуального зв'язку χ_b і додатних матриць λ , розміщених на його віртуальних зв'язках.

Наступним завданням є пошук тензорів B граничного $\langle l \rangle$ iPEPS. У цьому розділі ми скористаємося ще однією пропозицією з роботи [35] і адаптуємо схему простого оновлення для знаходження B . Тим не менш, наша реалізація простого оновлення відрізняється від [35]. Ми пропонуємо явно використовувати двохарову структуру тензорів поперечної матриці A , щоб зменшити витрати обчислень простого оновлення до $\chi_b^5 D^7$.

Ми пропонуємо застосувати матрицю переносу M до bPEPS шар за шаром: спочатку наносимо шар, що складається лише з T тензорів, як показано на Рис. 3.4(a). Потім тензори T поглинаються bPEPS. Цей має обчислювальний час пропорційний до $\chi_b^4 D^7$ і пам'ять пропорційну до $\chi_b^4 D^6$. В результаті отримуємо нові розширені тензори B' , з віртуальними індексами розмірності $\chi_b \times D$. Тепер цей новий збільшений тензор слід усікти до початкової розмірності χ_b . Це можна зробити або за допомогою канонічної форми простого оновлення, або за допомогою деякого варіанту повного оновлення (можливі також проміжні варіанти, наприклад, NNU). Після усікання отримуємо новий допоміжний тензор B_a (він є допоміжним, оскільки не з'являється в усереднених обчисленнях і використовується лише як проміжний крок в оптимізації bPEPS). Цьому тензору B_a відповідає також допоміжна матриця додатних зв'язків λ_a . Тепер ми можемо накласти шар тензорів T^\dagger на допоміжний bPEPS B_a . Це показано на Рис. 3.4(c). Як було обговорено раніше, ми спочатку поглинаємо тензори T^\dagger у B_a , а потім усікаємо їх до початкової розмірності зв'язків χ_b . В результаті маємо отримати початковий bPEPS тензор B . Ця ітерація оновлення повторюється до збіжності B . Зауважте, що якщо початкові об'ємні тензори T мали більшу елементарну комірку, то цикл може включати більшу кількість аплікацій шарів.

Щоб завершити опис оновлення bPEPS, ми також повинні обговорити процедуру усікання. У випадку простого оновлення це робиться так само, як було описано раніше для 3d-оптимізації.

3.3 Знаходження середніх: CTMRG

Після того, як ми знайшли граничний iPEPS, ми можемо використовувати його для знаходження спостережуваних величин. Для обчислення спостережуваних величин потрібен метод скорочення нескінченної 2d тензорної мережі, яка складається з 3 різних шарів тензорів – центрального

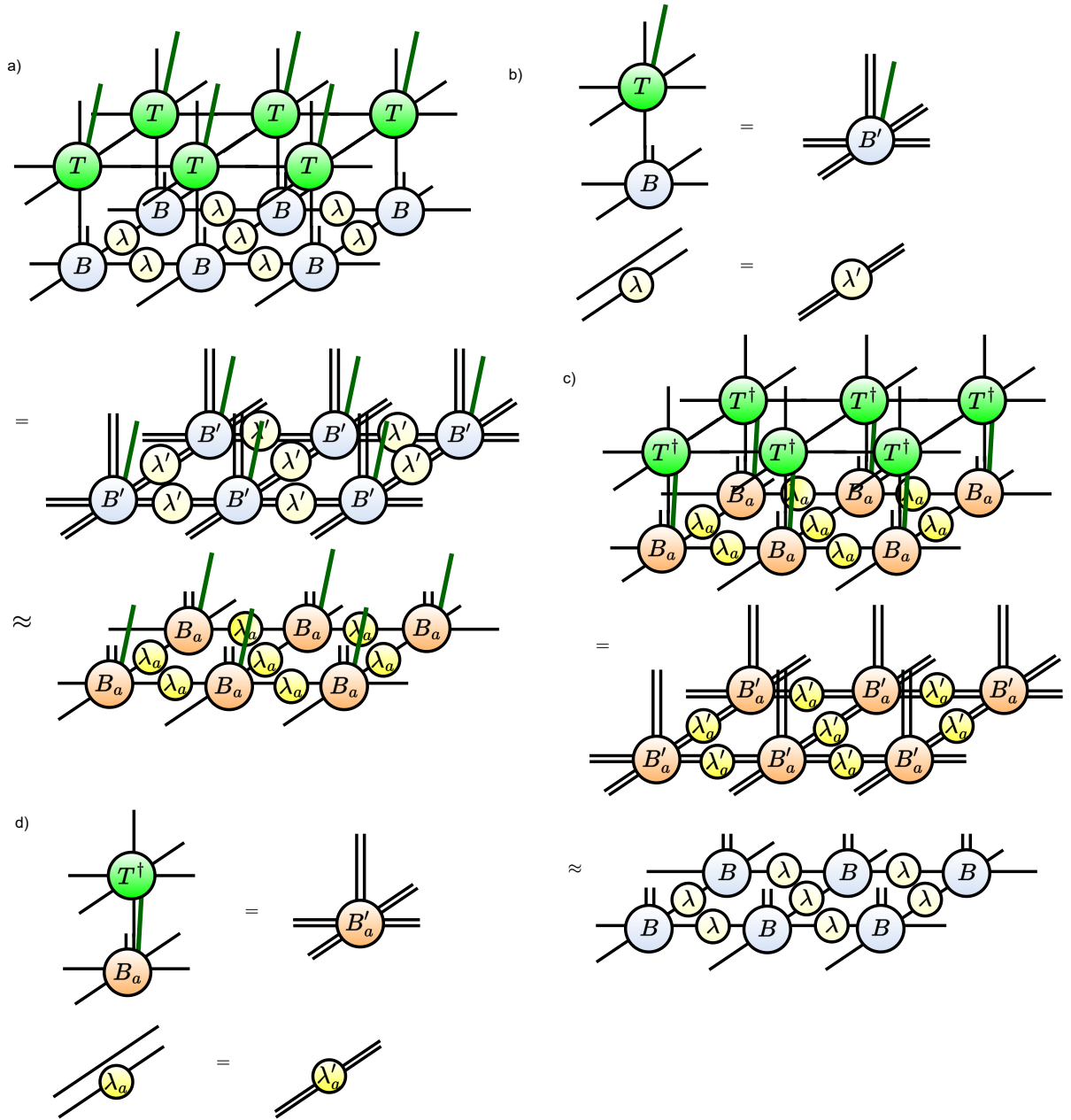


Рис. 3.4: а) Матриця переносу M може бути застосована до bPEPS по шарово. На першому етапі ми наносимо лише шар, що складається з тензорів T . б) Тензори T поглинаються тензором bPEPS B для отримання нового збільшеного тензора B' . На наступному кроці розмірність зв'язків тензора B' усікається до початкової розмірності χ_b за допомогою деякого варіанту процедури усікання. В результаті отримуємо новий допоміжний (проміжний) тензор B_a . с) Тепер ми можемо повторити обчислення з другим шаром, що складається з тензорів T^\dagger . д) Спочатку ми поглинаємо T^\dagger у B_a , а потім усікаємо збільшені тензори B'_a назад до початкової розмірності χ_b . В результаті отримуємо вихідні bPEPS тензори B . Такі ітерації повторюються до збіжності тензора B та його λ матриці.

шару A -тензорів і двох граничних шарів із граничних iPEPS. Ця 2d тензорна мережа показана на Рис. 3.5(a). Операторні середні можуть бути отримані з цього скорочення за допомогою додаткових локальних операторних вставок всередині об'ємних тензорів A . Таку тензорну мережу можна наближено згорнути за допомогою методу CTMRG або граничного MPS. Для застосування CTMRG ми повинні на першому етапі поглинути матриці зв'язків λ bPEPS у граничні тензори B (отримавши нові тензори b), а потім стиснути тензори b, A в одношаровий тензор t (див. Рис. 3.5(a)). Розмірність зв'язку цього нового тензора t дорівнює $D^2\chi_b^2$, що призводить до дуже дорогого стискання CTMRG [35]. Тому природно шукати деяку спрощену схему згортки двовимірної тензорної мережі, яка б ефективно використовувала багат шарову структуру мережі.

По-перше, можна помітити, що тензорну мережу можна подати у вигляді, показаному на Рис. 3.5(b), де ми поглинули підшари тензорів A у граничні iPEPS. Зауважте, що цей крок виконано в точності. Отримана мережа має лише два шари, і, як буде описано нижче, вже може бути ефективно використана для зменшення обчислювальних витрат. Тут ми скористаємося додатковим наближенням кроком і скоротимо розмірність тензорів B' (або простим, або повним оновленням, як обговорювалося вище), щоб отримати двошарову тензорну мережу, що складається з тензорів B_a (які мають розмірність зв'язку χ_b).

На цьому етапі ми фактично звели проблему згортання тензорної мережі до звичайного згортання, що з'являється в розрахунках 2d iPEPS, яке, як правило, піддається вирішенню. Тим не менш, мережа все ще має багат шарову структуру. Ми можемо використати цю багат шарову структуру, як це було запропоновано в працях [94, 95, 155, 156] для подальшого зменшення обчислювальних витрат.

Подальшого зменшення обчислювальних витрат можна досягти за допомогою відображення двошарової тензорної мережі (зі скороченими тензорами B_a) в одношарову тензорну мережу зі збільшеною елементарною коміркою, як показано на Рис. 3.6. Таке відображення являє собою двоетапну процедуру, де спочатку матриці зв'язків λ_a поглинаються об'ємними тензорами, а потім об'ємні тензори відображаються в ефективну комірку 2×2 . Це відображення робить найбільшу ефективну розмірність зв'язку

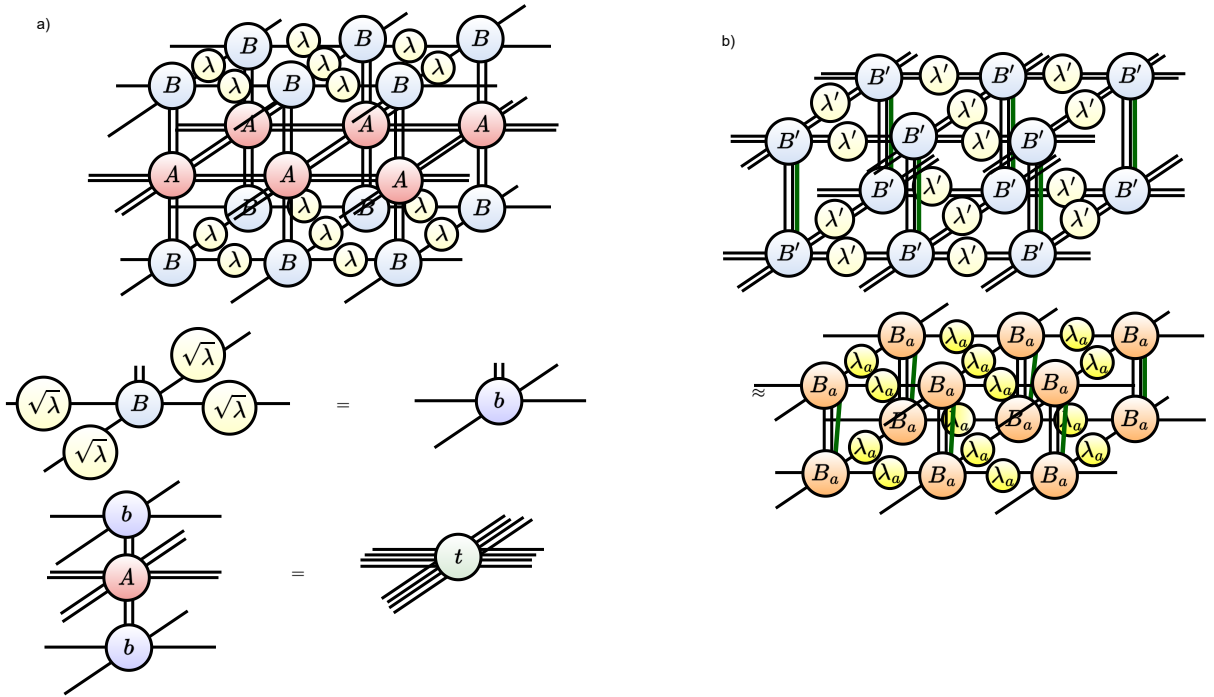


Рис. 3.5: а) Нескінченна 2d тензорна мережа, необхідна для обчислення локальних спостережень. Матриці зв'язків λ можуть бути поглинуті тензорами bPEPS B , отримуючи нові граничні тензори b . Граничні тензори b можуть охоплювати об'ємний тензор A у новий одношаровий тензор t з розмірністю зв'язків $D^2\chi_b^2$. б) Альтернативно, ми можемо поглинути тензори T (з A) у шари bPEPS, отримавши двошарову структуру тензорів B' . Цю структуру можна далі апроксимувати (з усіканням розмірності додаткових індексів до χ_b) до двошарової тензорної мережі, що складається з тензорів B_a .

мережі пропорційною до $\chi_b D$, що асимптотично менше, ніж χ_b^2 масштабування двошарової мережі. Проте в цьому випадку переваги одношарового відображення не дуже вражають.

Тепер ми можемо повернутися до нередукованої двошарової тензорної мережі, показаної на Рис. 3.5(b) (що складається з тензорів B'). Для цієї мережі ми також маємо двошарову структуру. Отже, ми можемо застосувати те саме одношарове відображення, яке раніше використовували для скорочених тензорів. Це відображення показано на Рис. 3.7. Отримана тензорна мережа має збільшені елементарні комірки, але менші розмірності зв'язків, причому найбільша розмірність зв'язків масштабується як $\chi_b D^2$ замість $\chi_b^2 D^2$. Якщо розмірність зв'язку СТМРГ χ_c не змінюється відносно відображення, то ми вже отримаємо значне зменшення витрат. Зауважимо, що в цій процедурі ми не використовували жодних усікань розмірності зв'язків тензорів B' , тому отримане одношарове скорочення еквівалентне згортці мережі на Рис. 3.5(a).

Проте, це відображення не використовує повну багатошарову структуру мережі на Рис. 3.5(a), оскільки ця мережа також має 3-шарову та 4-шарову структуру. Цілком природно запитати, чи можна використати ці 3- або 4-шарові форми тензорної мережі для побудови одношарового відображення зі збільшеною елементарною коміркою, яке матиме значно менші розміри зв'язків. Такі відображення показано на Рис. 3.8. Тут показано два різних відображення: перше відображається в одношарову тензорну мережу з коміркою розміром 3×3 і максимальним розміром зв'язку $\max(\chi_b D, D^3)$, тоді як друге призводить до комірки розміром 4×4 і масштабування максимального розміру зв'язку як $\chi_b D$. Це призводить до зменшення вартості розрахунку СТМРГ, який масштабується як $\chi_c^3 D^3 \chi_b^3 + \chi_c^2 (D^6 + D^2 \chi_b^4)$. Якщо χ_c має масштабування $\chi_c \propto \chi_b^2$, а $\chi_b \propto D$, то вартість масштабується як D^{12} , що є досяжним до достатньо великого D .

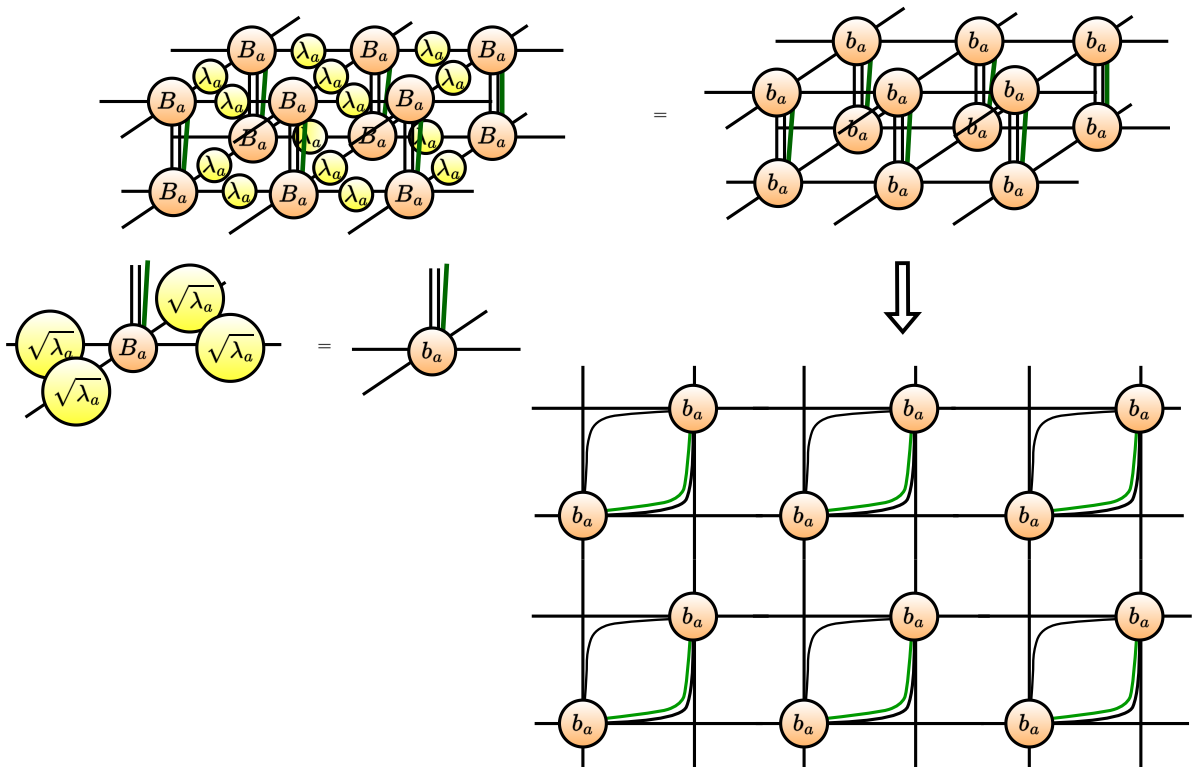


Рис. 3.6: Ілюстративний приклад відображення двошарової тензорної мережі з коміркою 1×1 в одношарову тензорну мережу з коміркою 2×2 . Відображення вводить допоміжні тензори, які складаються лише з добутків дельт Кронекера.

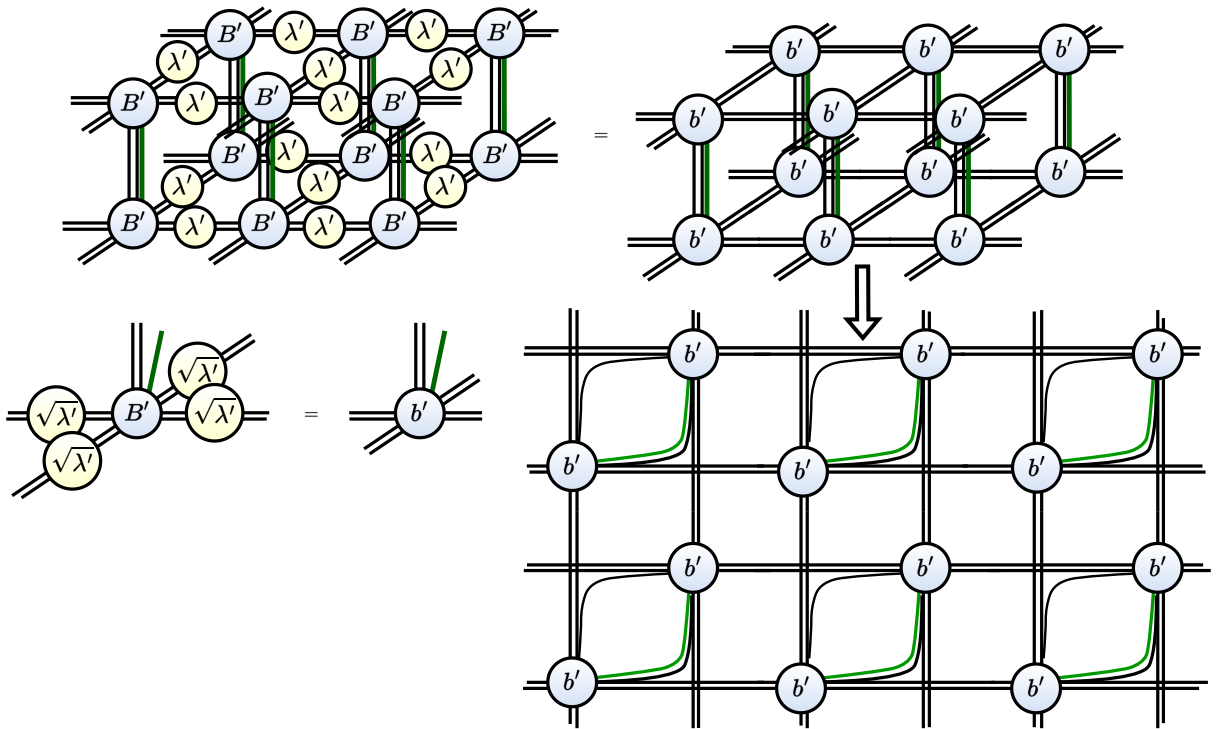


Рис. 3.7: Відображення нескороченої двошарової тензорної мережі з одиничною коміркою 1×1 в одношарову тензорну мережу з одиничною коміркою 2×2 . Відображення також вводить допоміжні тензори, які складаються лише з добутків дельт Кронекера.

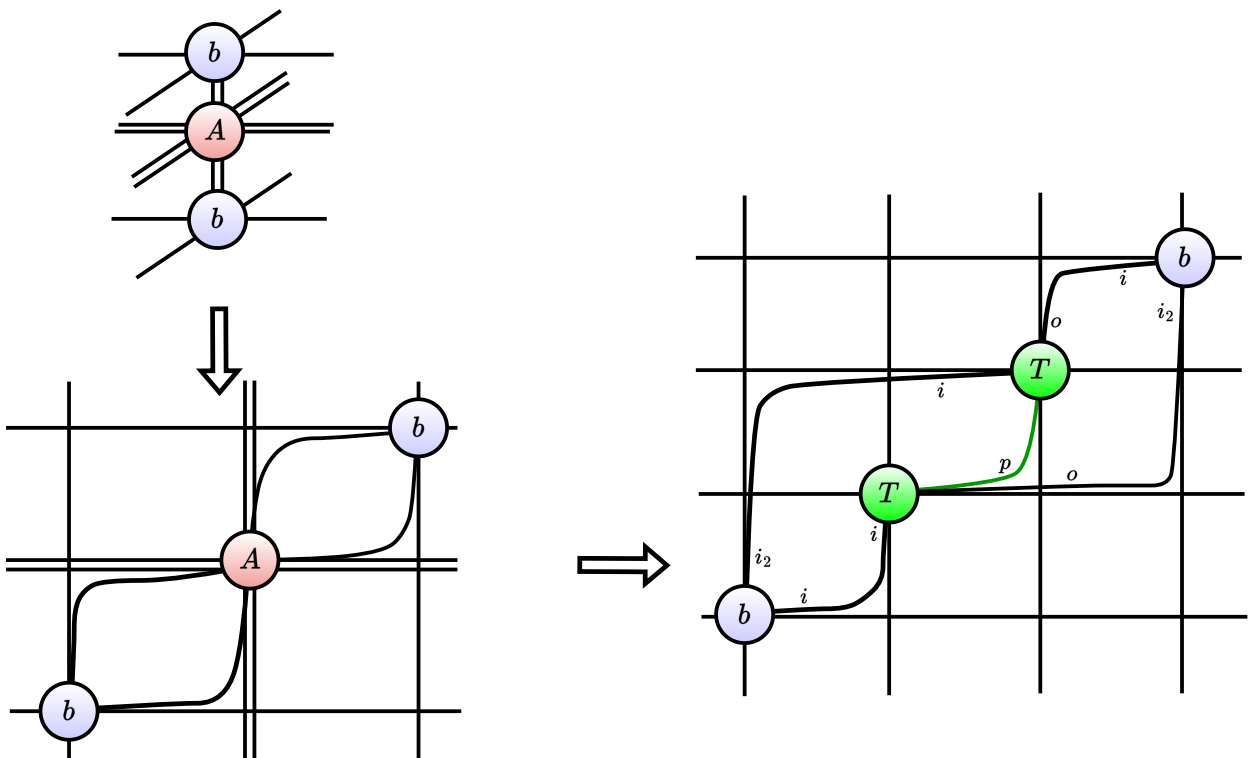


Рис. 3.8: Ілюстрація відображення 4-шарової тензорної мережі в одношарові мережі з 3×3 або 4×4 елементарними комірками.

РОЗДІЛ 4

Результати

Нашим основним тестом алгоритму є модель Гейзенберга на кубічній решітці, яка була введена у першому розділі. Модель перебуває в безщілинній антиферромагнітній фазі з шаховою елементарною коміркою. Проте її можна відобразити до системи з одновузловою коміркою за допомогою унітарного перетворення R на всіх вузлах однієї шахової підґратки. Виберемо нашу хвильову функцію дійсною (так, щоб намагніченість лежала в площині XZ), а потім виберемо унітарне перетворення $R = \exp[i\pi S^y] = i\sigma^y$, яке повертає намагніченість на одній підґратці на кут π . Після унітарного перетворення iPEPS всередині системи стає повністю однорідним з однаковими тензорами на всіх ділянках. Зауважимо також, що хвильова функція зберігає симетрії обертання та відбиття ґратки.

Ми оптимізували хвильову функцію iPEPS за допомогою багатократної аплікації PEPO, який апроксимував оператор $\exp(-Hdt)$ з $dt = 0.02$. Для апроксимації використано тривимірне узагальнення методу W^I з роботи [154]. Збіжність, як правило, досягалася за кілька десятків аплікацій PEPO, а час оптимізації був значно меншим, ніж час подальшого обчислення середніх.

Після того, як ми отримали оптимізовані хвильові функції iPEPS, ми можемо порівняти різні методи для знаходження спостережуваних. Для цього ми зосередимося на хвильовій функції iPEPS $D = 3$, для якої можна використовувати різні обчислювальні схеми. Спочатку ми обговоримо збіжність цих результатів з χ_b і χ , а також порівняємо їх між собою.

Спочатку на Рис. 4.1 ми показуємо результати для різних χ_b і $D = 3$ для різних методів обчислення. Результати показано після збіжності в χ . Видно, що результати методів без усікання повністю збігаються, що доводить правильність збіжності цих методів. Слід зазначити, що двошарова схема була значно затратнішою з точки зору обчислювального часу, ніж одношарова. Тому в наведених нижче обчисленнях ми завжди використовуємо одношаровий метод. Двошаровий метод з проекцією в принципі має таку ж вартість, як і одношаровий, але необхідність усікання зменшує його точність. Нам потрібно набагато більше χ_b для подвійного шару з методом

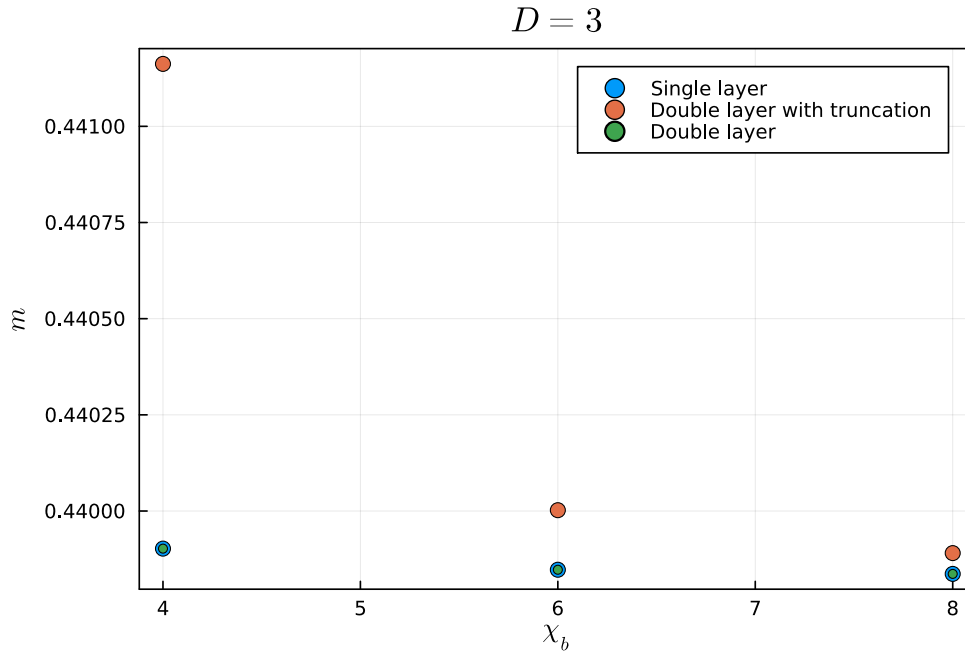


Рис. 4.1: Збіжність локальної намагніченості з розмірністю зв'язку граничного PEPS χ_b для хвильової функції iPEPS з розмірністю зв'язку $D = 3$ і з різними методами обчислення CTMRG: одношаровий (з коміркою 4×4), двошаровий (з коміркою 2×2) та двошаровий з усіканням (з коміркою 2×2 , але з розмірами зв'язків тензорів, усіченими до χ_b з простим оновленням канонічної форми, як обговорювалося в попередньому розділі).

усікання, щоб досягти приблизно такої ж точності. У наших розрахунках розмірність χ_b була найбільшим обмеженням (ми могли б легко досягти більших D або χ , якби не вимоги до пам'яті для більших χ_b). Отже, подвійний шар з усіканням виявився менш ефективним, ніж одношаровий підхід.

Тепер зосередимося на одношарових обчисленнях. Потрібно з'ясувати, які χ_b і χ необхідні для отримання точних результатів. На Рис. 4.2 показано збіжність намагніченості з χ для $D = 7$, $\chi_b = 16$ (це були максимальні D і χ_b , яких ми змогли досягти). Збіжність була досягнута для $\chi \approx 200$. Загалом ми спостерігали наближений закон $\chi \approx \chi_b^2$. На Рис. 4.3 і 4.4 показано збіжність намагніченості m та енергії зв'язку E з χ_b для $D = 4, 6$. Для $D = 4$ збіжність досягнута вже при $\chi_b = 8$. Для $D = 6$ збіжність досягнута при $\chi_b \approx 14 - 15$ (для $D = 5$ – при $\chi_b = 12$). Здається, що необхідне значення χ_b становить принаймні $2D$. На жаль, ми не можемо точно вказати залежність, і очікуємо, що визначення залежності потребуватиме детального дослідження збіжності також для інших моделей.

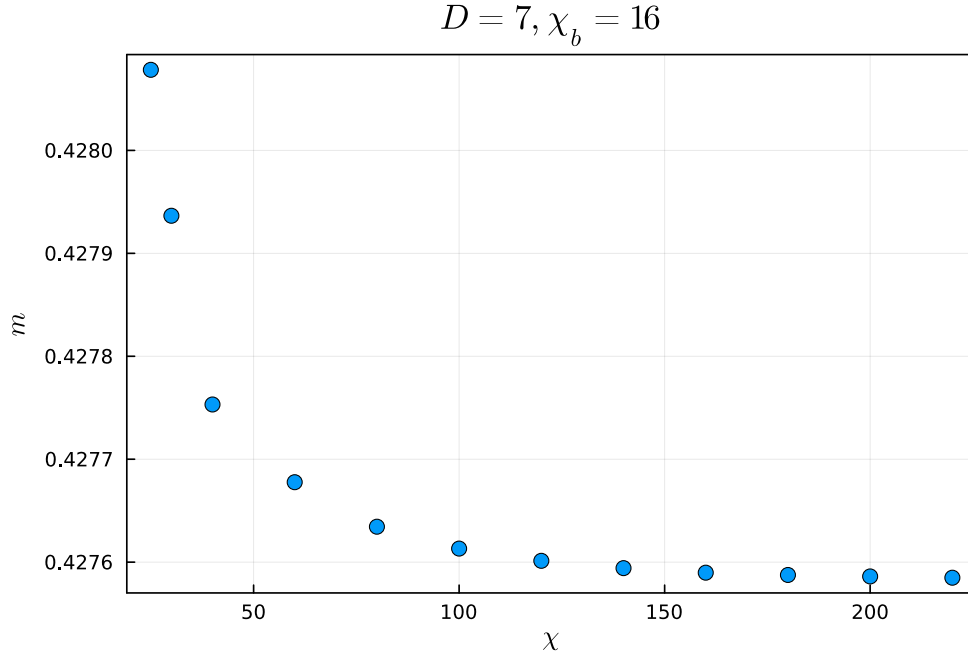


Рис. 4.2: Збіжність локальної намагніченості з розмірністю зв'язку СТМРГ χ для хвильової функції іPEPS з розмірністю зв'язку $D = 7$ і з граничним іPEPS з розмірністю зв'язку $\chi_b = 16$.

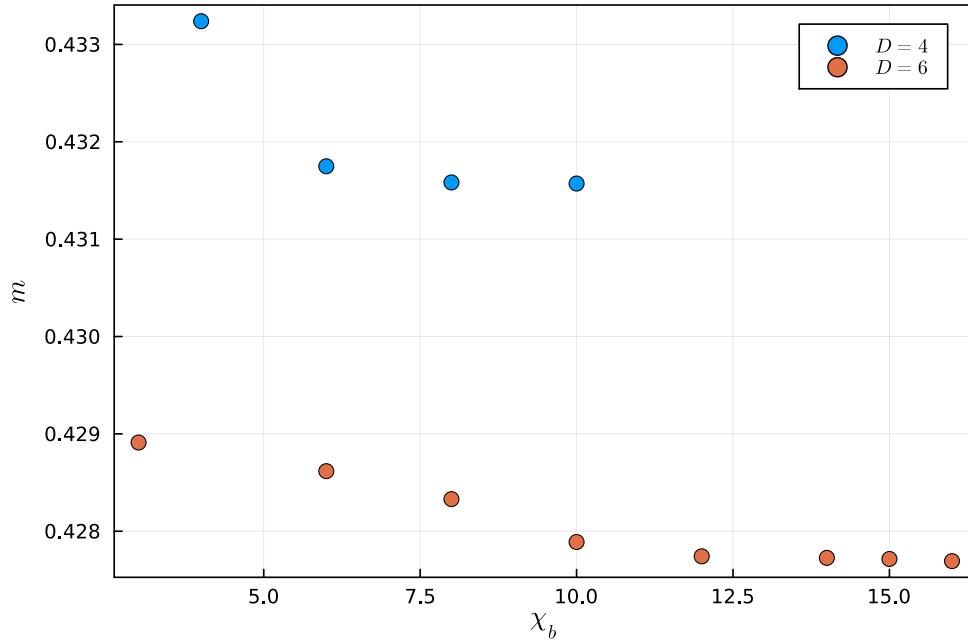


Рис. 4.3: Збіжність локальної намагніченості з розмірністю зв'язку граничного іPEPS χ_b для хвильової функції іPEPS з розмірністю зв'язку $D = 4, 6$.

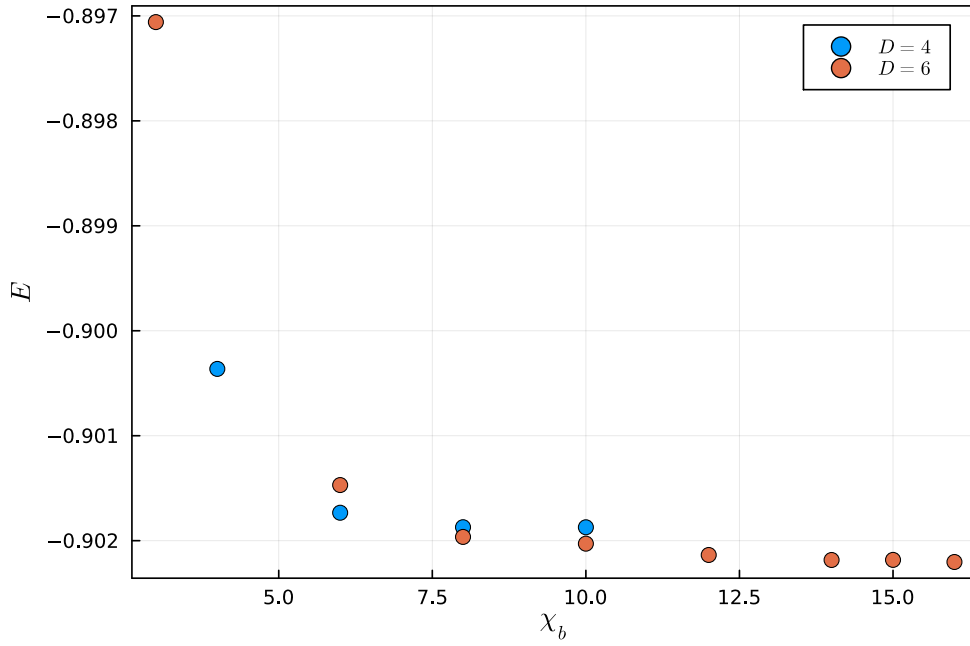


Рис. 4.4: Збіжність енергії E з розмірністю зв'язку граничного iPEPS χ_b для хвильової функції iPEPS з розмірністю зв'язку $D = 4, 6$.

Наша наступна мета – продемонструвати всі наші результати для різних розмірностей D та екстраполювати їх до межі нескінченної D . Ми використовуємо кореляційну довжину ξ для екстраполяції наших спостережуваних. Зауважимо, що в одношаровому підході кореляційна довжина може бути знайдена за тією ж ціною, що і для двовимірних задач. Для екстраполяції ми використали такі співвідношення масштабування [157]:

$$m^2(\xi) = m^2(\infty) + b/\xi^2, \quad (4.1)$$

$$E(\xi) = E(\infty) + a/\xi^4. \quad (4.2)$$

Результати аналізу показано на Рис. 4.5 та 4.6. Ми отримали $E = -0.90237(2)$ для енергії та $m^2 = 0.1781(3)$ для намагніченості. Для моделювання ми використали дані, отримані з симуляцій з $D = 4, 5, 6, 7$ (результати для $D = 3$ не дуже добре узгоджувалися з анзацом підгонки). Зауважимо додатково, що довжина кореляції обчислювалася для найбільшого з доступних значень χ_b, χ для даного D і не екстраполювалася на нескінченну межу χ, χ_b , тому можливі похибки в довжині кореляції). Ці результати добре узгоджуються з результатами квантового Монте-Карло моделювання $E_{MC} = -0.902325(11)$, $m_{MC}^2 = 0.1786(4)$ [35].

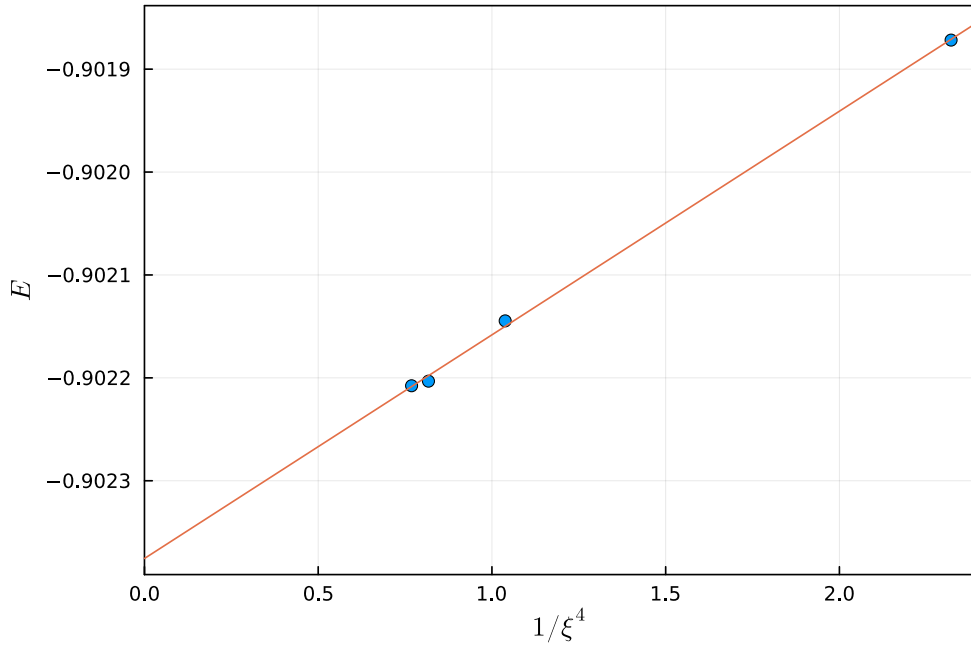


Рис. 4.5: Екстраполяція енергії на основі кореляційної довжини ξ . Розрахована енергія приблизно дорівнює $E = -0.90237(2)$. Результати отримано для $D = 4, 5, 6, 7$.

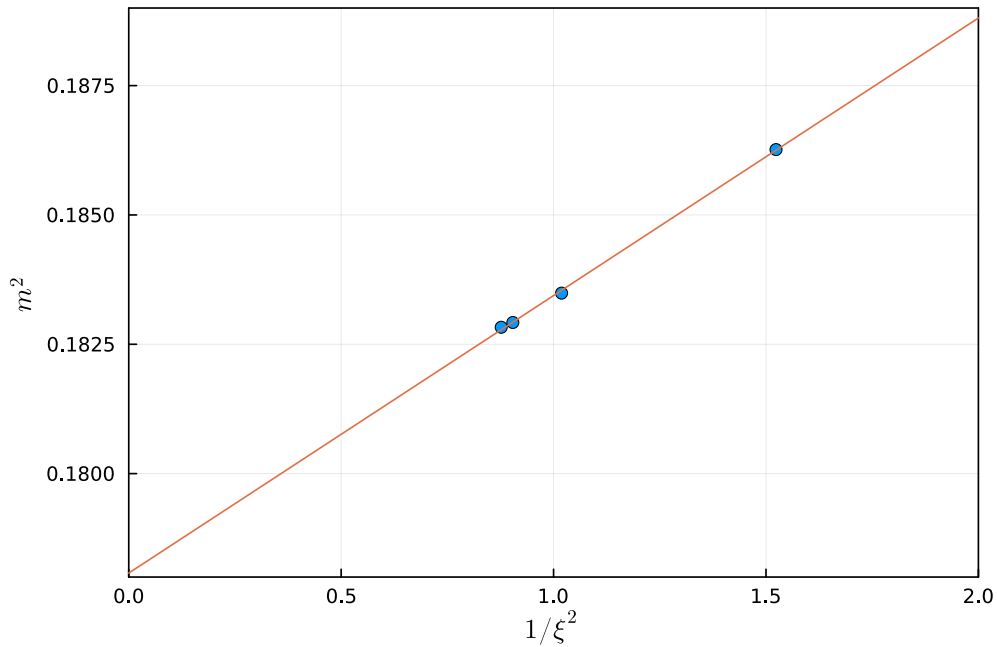


Рис. 4.6: Екстраполяція намагніченості на основі кореляційної довжини ξ . Отримана намагніченість приблизно дорівнює $m^2 = 0.1781(3)$. Результат отримано для $D = 4, 5, 6, 7$.

ВИСНОВКИ

У цій роботі проведено огляд наявних методів і побудовано більш ефективний підхід тензорних мереж до тривимірних систем на решітках. Для цього спочатку окреслено фізичні системи, які описують моделями на решітках і виведено їх гамільтонаїни. Також ми наводимо перелік можливих фаз цих гамільтоніанів і інших важливих характеристик таких систем.

Оскільки нас цікавлять тензорні мережі, у другому розділі ми приводимо вступ до квантової теорії інформації й квантової заплутаності, з яких виводимо ідею тензорних мереж. Ми ілюструємо практичне застосування тензорних мереж спочатку для одновимірних систем, таких як спіновий ланцюг Галдейна, а після цього і для двовимірних систем. Для двовимірних решіток ми детально обговорюємо можливі алгоритми оптимізації і обчислення середніх значень операторів, наводячи різні варіанти алгоритма CTMRG. Для наочності ми наводимо результати застосування CTMRG.

У третьому розділі ми починаємо працювати з основною темою нашого дослідження – тривимірними тензорними мережами. Для цього ми проводимо огляд вже розроблених тривимірних алгоритмів і описуємо їх недоліки, в першу чергу – дуже значний час обчислень. Далі ми пропонуємо низку модифікацій, які дозволяють значно знизити обчислювальний час алгоритму завдяки ефективному використанню багат шарової структури тензорної мережі. Запропонований алгоритм дозволяє вивчати тривимірні тензорні мережі із таким самим масштабуванням обчислювального часу, який до недавнього часу був характерним і для двовимірних систем.

У секції результатів ми тестуємо запропонований алгоритм на тривимірній моделі Гейзенберга на кубічній решітці. Результати добре узгоджуються з попередніми результатами Монте-Карло. Завдяки значному зниженню часу обчислень ми змогли досягти розмірності зв'язку $D = 7$ (найточніші попередні результати використовували лише $D = 3$). Така розмірність зв'язку тензорної мережі дає змогу отримати досить високу точність результатів для тривимірних систем.

Існує досить багато напрямів подальших досліджень. Основним обмеженням для подальших досліджень із ще більшими D були затрати оперативної пам'яті. Для їх зниження можна використовувати розріджені тензори із симетріями, що дозволить досягти ще більших $D = 8 - 9$ й збільши-

ти точність результатів. Іншою важливою метою може бути узагальнення запропонованих алгоритмів до більших елементарних комірок і до інших решіток. Особливо цікавою є пірохлорова решітка, для якої модель Гайзенберга знаходиться у тривимірній топологічній фазі [77]. Узагальнення на інші решітки потребує більш складного граничного іPEPS й CTMRG, але, можливо, може мати зменшений час обчислень. Щодо теорій з більшими елементарними комірками, то тут цікавими є $SU(N)$ -симетричні моделі Гейзенберга з можливою анізотропією, які мають містити цілу низку різних магнітних і топологічних фаз [158]. Ще одним цікавим напрямком досліджень є ферміонні моделі, які можуть бути вивчені із запропонованим методом після деяких модифікацій. З точки зору усіх цих моделей буде потрібно також з'ясувати збіжність результатів із χ і χ_b у загальному випадку.

З точки зору розробки алгоритмів існує декілька можливих узагальнень. По-перше, недавно запропонований алгоритм [156] дає змогу проводити ефективно одношарові розрахунки з CTMRG без збільшення елементарної комірки, можна спробувати узагальнити на тривимірні тензорні мережі. По-друге, представлені алгоритми можна використати для вивчення систем при скінченній температурі [96] та динаміки у часі [71, 159, 160], а не тільки основного стану. Крім того, оптимізацію за допомогою простого оновлення можна спробувати замінити на тривимірний алгоритм оптимізації із повним оновленням [78]. Час такої оптимізації буде вище за просте оновлення, але результати будуть мати вищу точність.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki, “Quantum entanglement,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 81, pp. 865–942, Jun 2009.
2. A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, “Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?,” *Phys. Rev.*, vol. 47, pp. 777–780, May 1935.
3. J. S. Bell, “On the einstein podolsky rosen paradox,” *Physics Physique Fizika*, vol. 1, pp. 195–200, Nov 1964.
4. S. J. Freedman and J. F. Clauser, “Experimental test of local hidden-variable theories,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 28, pp. 938–941, Apr 1972.
5. J. F. Clauser and A. Shimony, “Bell’s theorem. experimental tests and implications,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 41, p. 1881, dec 1978.
6. A. Aspect, J. Dalibard, and G. Roger, “Experimental test of bell’s inequalities using time-varying analyzers,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, pp. 1804–1807, Dec 1982.
7. M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*. Cambridge university press, 2010.
8. J. Preskill, “Quantum computing in the nisq era and beyond,” *Quantum*, vol. 2, p. 79, 2018.
9. P. W. Shor, “Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring,” in *Proceedings 35th annual symposium on foundations of computer science*, pp. 124–134, Ieee, 1994.
10. P. W. Shor, “Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer,” *SIAM review*, vol. 41, no. 2, pp. 303–332, 1999.
11. L. K. Grover, “A fast quantum mechanical algorithm for database search,” in *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 212–219, 1996.
12. H. J. Briegel, D. E. Browne, W. Dür, R. Raussendorf, and M. Van den Nest, “Measurement-based quantum computation,” *Nature Physics*, vol. 5, no. 1, pp. 19–26, 2009.
13. M. Freedman, A. Kitaev, M. Larsen, and Z. Wang, “Topological quantum computation,” *Bulletin of the American Mathematical Society*, vol. 40, no. 1, pp. 31–38, 2003.

14. C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. D. Sarma, “Non-abelian anyons and topological quantum computation,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 80, no. 3, p. 1083, 2008.
15. Z. Wang, *Topological quantum computation*. No. 112, American Mathematical Soc., 2010.
16. N. Laflorencie, “Quantum entanglement in condensed matter systems,” *Physics Reports*, vol. 646, pp. 1–59, 2016.
17. X.-G. Wen, “Topological order: From long-range entangled quantum matter to a unified origin of light and electrons,” *International Scholarly Research Notices*, vol. 2013, 2013.
18. X.-G. Wen, “Colloquium: Zoo of quantum-topological phases of matter,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 89, no. 4, p. 041004, 2017.
19. H.-C. Jiang, Z. Wang, and L. Balents, “Identifying topological order by entanglement entropy,” *Nature Physics*, vol. 8, no. 12, pp. 902–905, 2012.
20. S. Ryu and T. Takayanagi, “Holographic derivation of entanglement entropy from the anti-de sitter space/conformal field theory correspondence,” *Physical review letters*, vol. 96, no. 18, p. 181602, 2006.
21. T. Nishioka, “Entanglement entropy: holography and renormalization group,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 90, no. 3, p. 035007, 2018.
22. M. B. Hastings, “An area law for one-dimensional quantum systems,” *Journal of statistical mechanics: theory and experiment*, vol. 2007, no. 08, p. P08024, 2007.
23. J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, “Colloquium: Area laws for the entanglement entropy,” *Reviews of modern physics*, vol. 82, no. 1, p. 277, 2010.
24. H. Li and F. D. M. Haldane, “Entanglement spectrum as a generalization of entanglement entropy: Identification of topological order in non-abelian fractional quantum hall effect states,” *Physical review letters*, vol. 101, no. 1, p. 010504, 2008.
25. G. Knizia and G. K.-L. Chan, “Density matrix embedding: A simple alternative to dynamical mean-field theory,” *Physical review letters*, vol. 109, no. 18, p. 186404, 2012.
26. T. Ayrál, T.-H. Lee, and G. Kotliar, “Dynamical mean-field theory,

- density-matrix embedding theory, and rotationally invariant slave bosons: A unified perspective,” *Physical Review B*, vol. 96, no. 23, p. 235139, 2017.
27. J. I. Cirac, D. Perez-Garcia, N. Schuch, and F. Verstraete, “Matrix product states and projected entangled pair states: Concepts, symmetries, theorems,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 93, no. 4, p. 045003, 2021.
 28. S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 69, pp. 2863–2866, Nov 1992.
 29. G. Vidal, “Efficient simulation of one-dimensional quantum many-body systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, p. 040502, Jul 2004.
 30. J. Haegeman, J. I. Cirac, T. J. Osborne, I. Pižorn, H. Verschelde, and F. Verstraete, “Time-dependent variational principle for quantum lattices,” *Physical review letters*, vol. 107, no. 7, p. 070601, 2011.
 31. U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states,” *Annals of physics*, vol. 326, no. 1, pp. 96–192, 2011.
 32. R. Orús, T.-C. Wei, O. Buerschaper, and M. Van den Nest, “Geometric entanglement in topologically ordered states,” *New Journal of Physics*, vol. 16, no. 1, p. 013015, 2014.
 33. P. S. Tarabunga, E. Tirrito, M. C. Banuls, and M. Dalmonte, “Nonstabilizerness via matrix product states in the pauli basis,” *arXiv preprint arXiv:2401.16498*, 2024.
 34. B. Bruognolo, J.-W. Li, J. von Delft, and A. Weichselbaum, “A beginner’s guide to non-abelian ipeps for correlated fermions,” *SciPost Physics Lecture Notes*, p. 025, 2021.
 35. P. C. G. Vlaar and P. Corboz, “Simulation of three-dimensional quantum systems with projected entangled-pair states,” *Phys. Rev. B*, vol. 103, p. 205137, May 2021.
 36. A. García-Sáez and J. I. Latorre, “Renormalization group contraction of tensor networks in three dimensions,” *Physical Review B*, vol. 87, no. 8, p. 085130, 2013.
 37. H. A. Kramers and G. H. Wannier, “Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part ii,” *Phys. Rev.*, vol. 60, pp. 263–276, Aug 1941.
 38. “Dimers on a rectangular lattice,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 9, no. 4, pp. 650–654, 1968.
 39. R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*. Elsevier,

- 2016.
40. V. Murg, V. E. Korepin, and F. Verstraete, “Algebraic bethe ansatz and tensor networks,” *Physical Review B*, vol. 86, no. 4, p. 045125, 2012.
 41. K. G. Wilson, “The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 47, pp. 773–840, Oct 1975.
 42. S. Östlund and S. Rommer, “Thermodynamic limit of density matrix renormalization,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 3537–3540, Nov 1995.
 43. A. Weichselbaum, F. Verstraete, U. Schollwöck, J. I. Cirac, and J. von Delft, “Variational matrix-product-state approach to quantum impurity models,” *Physical Review B*, vol. 80, no. 16, p. 165117, 2009.
 44. G. Vidal, “Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, p. 147902, Oct 2003.
 45. F. Verstraete and J. I. Cirac, “Renormalization algorithms for quantum-many body systems in two and higher dimensions,” 2004.
 46. N. Reshetikhin and V. G. Turaev, “Invariants of 3-manifolds via link polynomials and quantum groups,” *Inventiones mathematicae*, vol. 103, no. 1, pp. 547–597, 1991.
 47. V. G. Turaev and O. Y. Viro, “State sum invariants of 3-manifolds and quantum 6j-symbols,” *Topology*, vol. 31, no. 4, pp. 865–902, 1992.
 48. M. C. Bañuls, “Tensor network algorithms: A route map,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 14, pp. 173–191, 2023.
 49. K. Okunishi, T. Nishino, and H. Ueda, “Developments in the tensor network—from statistical mechanics to quantum entanglement,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 91, no. 6, p. 062001, 2022.
 50. R. Orús, “A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states,” *Annals of physics*, vol. 349, pp. 117–158, 2014.
 51. R. Orús, “Tensor networks for complex quantum systems,” *Nature Reviews Physics*, vol. 1, no. 9, pp. 538–550, 2019.
 52. M. M. Wolf, F. Verstraete, M. B. Hastings, and J. I. Cirac, “Area laws in quantum systems: mutual information and correlations,” *Physical review letters*, vol. 100, no. 7, p. 070502, 2008.
 53. F. Verstraete, M. M. Wolf, D. Perez-Garcia, and J. I. Cirac, “Criticality, the area law, and the computational power of projected entangled pair states,”

- Physical review letters*, vol. 96, no. 22, p. 220601, 2006.
54. D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. I. Cirac, “Matrix product state representations,” *arXiv preprint quant-ph/0608197*, 2006.
 55. I. V. Oseledets, “Tensor-train decomposition,” *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 33, no. 5, pp. 2295–2317, 2011.
 56. Y.-Y. Shi, L.-M. Duan, and G. Vidal, “Classical simulation of quantum many-body systems with a tree tensor network,” *Physical review a*, vol. 74, no. 2, p. 022320, 2006.
 57. G. Vidal, “Class of quantum many-body states that can be efficiently simulated,” *Physical review letters*, vol. 101, no. 11, p. 110501, 2008.
 58. Z.-Y. Xie, J. Chen, J. Yu, X. Kong, B. Normand, and T. Xiang, “Tensor renormalization of quantum many-body systems using projected entangled simplex states,” *Physical Review X*, vol. 4, no. 1, p. 011025, 2014.
 59. P. Corboz, M. Lajkó, A. M. Läuchli, K. Penc, and F. Mila, “Spin-orbital quantum liquid on the honeycomb lattice,” *Phys. Rev. X*, vol. 2, p. 041013, Nov 2012.
 60. B. Bauer, P. Corboz, A. M. Läuchli, L. Messio, K. Penc, M. Troyer, and F. Mila, “Three-sublattice order in the $su(3)$ heisenberg model on the square and triangular lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. 85, p. 125116, Mar 2012.
 61. P. Corboz and F. Mila, “Tensor network study of the shastry-sutherland model in zero magnetic field,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 115144, Mar 2013.
 62. P. Corboz, K. Penc, F. Mila, and A. M. Läuchli, “Simplex solids in $su(n)$ heisenberg models on the kagome and checkerboard lattices,” *Phys. Rev. B*, vol. 86, p. 041106, Jul 2012.
 63. P. Corboz, T. M. Rice, and M. Troyer, “Competing states in the t - j model: Uniform d -wave state versus stripe state,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 046402, Jul 2014.
 64. P. Corboz, R. Orús, B. Bauer, and G. Vidal, “Simulation of strongly correlated fermions in two spatial dimensions with fermionic projected entangled-pair states,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 165104, Apr 2010.
 65. P. Corboz, S. R. White, G. Vidal, and M. Troyer, “Stripes in the two-dimensional t - j model with infinite projected entangled-pair states,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 041108, Jul 2011.
 66. C. V. Kraus, N. Schuch, F. Verstraete, and J. I. Cirac, “Fermionic projected

- entangled pair states,” *Phys. Rev. A*, vol. 81, p. 052338, May 2010.
67. T. B. Wahl, H.-H. Tu, N. Schuch, and J. I. Cirac, “Projected entangled-pair states can describe chiral topological states,” *Physical review letters*, vol. 111, no. 23, p. 236805, 2013.
 68. J. Hasik, M. Van Damme, D. Poilblanc, and L. Vanderstraeten, “Simulating chiral spin liquids with projected entangled-pair states,” *Physical Review Letters*, vol. 129, no. 17, p. 177201, 2022.
 69. D. Poilblanc, J. I. Cirac, and N. Schuch, “Chiral topological spin liquids with projected entangled pair states,” *Physical Review B*, vol. 91, no. 22, p. 224431, 2015.
 70. P. Czarnik, J. Dziarmaga, and P. Corboz, “Time evolution of an infinite projected entangled pair state: An efficient algorithm,” *Physical Review B*, vol. 99, no. 3, p. 035115, 2019.
 71. J. Dziarmaga, “Time evolution of an infinite projected entangled pair state: Neighborhood tensor update,” *Physical Review B*, vol. 104, no. 9, p. 094411, 2021.
 72. B. Bauer, P. Corboz, R. Orús, and M. Troyer, “Implementing global abelian symmetries in projected entangled-pair state algorithms,” *Physical Review B*, vol. 83, no. 12, p. 125106, 2011.
 73. L. Vanderstraeten, J. Haegeman, and F. Verstraete, “Simulating excitation spectra with projected entangled-pair states,” *Physical Review B*, vol. 99, no. 16, p. 165121, 2019.
 74. L. Vanderstraeten, M. Mariën, F. Verstraete, and J. Haegeman, “Excitations and the tangent space of projected entangled-pair states,” *Physical Review B*, vol. 92, no. 20, p. 201111, 2015.
 75. P. Czarnik and J. Dziarmaga, “Variational approach to projected entangled pair states at finite temperature,” *Physical Review B*, vol. 92, no. 3, p. 035152, 2015.
 76. H. C. Jiang, Z. Y. Weng, and T. Xiang, “Accurate determination of tensor network state of quantum lattice models in two dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 090603, Aug 2008.
 77. S. S. Jahromi and R. Orús, “Universal tensor-network algorithm for any infinite lattice,” *Physical Review B*, vol. 99, no. 19, p. 195105, 2019.
 78. J. Jordan, R. Orús, G. Vidal, F. Verstraete, and J. I. Cirac, “Classical si-

- mulation of infinite-size quantum lattice systems in two spatial dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 250602, Dec 2008.
79. H. N. Phien, J. A. Bengua, H. D. Tuan, P. Corboz, and R. Orús, “Infinite projected entangled pair states algorithm improved: Fast full update and gauge fixing,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 035142, Jul 2015.
 80. L. Vanderstraeten, J. Haegeman, P. Corboz, and F. Verstraete, “Gradient methods for variational optimization of projected entangled-pair states,” *Phys. Rev. B*, vol. 94, p. 155123, Oct 2016.
 81. H.-J. Liao, J.-G. Liu, L. Wang, and T. Xiang, “Differentiable programming tensor networks,” *Physical Review X*, vol. 9, no. 3, p. 031041, 2019.
 82. Y. Wu, S. Anand, S.-H. Lin, F. Pollmann, and M. P. Zaletel, “Two-dimensional isometric tensor networks on an infinite strip,” *Physical Review B*, vol. 107, no. 24, p. 245118, 2023.
 83. M. P. Zaletel and F. Pollmann, “Isometric tensor network states in two dimensions,” *Physical review letters*, vol. 124, no. 3, p. 037201, 2020.
 84. Z.-C. Gu, M. Levin, and X.-G. Wen, “Tensor-entanglement renormalization group approach as a unified method for symmetry breaking and topological phase transitions,” *Phys. Rev. B*, vol. 78, p. 205116, Nov 2008.
 85. T. Vieijra, J. Haegeman, F. Verstraete, and L. Vanderstraeten, “Direct sampling of projected entangled-pair states,” *Phys. Rev. B*, vol. 104, p. 235141, Dec 2021.
 86. R. Orús and G. Vidal, “Simulation of two-dimensional quantum systems on an infinite lattice revisited: Corner transfer matrix for tensor contraction,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 094403, Sep 2009.
 87. T. Nishino and K. Okunishi, “Corner transfer matrix renormalization group method,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 65, no. 4, pp. 891–894, 1996.
 88. T. Nishino and K. Okunishi, “Corner transfer matrix algorithm for classical renormalization group,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 66, no. 10, pp. 3040–3047, 1997.
 89. R. J. Baxter, “Variational approximations for square lattice models in statistical mechanics,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 19, pp. 461–478, 1978.
 90. R. Baxter, “Corner transfer matrices,” *Physica A: Statistical Mechanics*

- and its Applications*, vol. 106, no. 1-2, pp. 18–27, 1981.
91. K. Ueda, R. Krcmar, A. Gendiar, and T. Nishino, “Corner transfer matrix renormalization group method applied to the ising model on the hyperbolic plane,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 76, no. 8, pp. 084004–084004, 2007.
 92. A. Gendiar, R. Krcmar, K. Ueda, and T. Nishino, “Phase transition of clock models on a hyperbolic lattice studied by corner transfer matrix renormalization group method,” *Physical Review E*, vol. 77, no. 4, p. 041123, 2008.
 93. I. Lukin and A. Sotnikov, “Corner transfer matrix renormalization group approach in the zoo of archimedean lattices,” *arXiv preprint arXiv:2401.07274*, 2024.
 94. R. Haghshenas, S.-S. Gong, and D. N. Sheng, “Single-layer tensor network study of the heisenberg model with chiral interactions on a kagome lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. 99, p. 174423, May 2019.
 95. Z. Y. Xie, H. J. Liao, R. Z. Huang, H. D. Xie, J. Chen, Z. Y. Liu, and T. Xiang, “Optimized contraction scheme for tensor-network states,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 045128, Jul 2017.
 96. S. S. Jahromi and R. Orús, “Thermal bosons in 3d optical lattices via tensor networks,” *Scientific Reports*, vol. 10, no. 1, p. 19051, 2020.
 97. S. S. Jahromi, H. Yarloo, and R. Orús, “Thermodynamics of three-dimensional kitaev quantum spin liquids via tensor networks,” *Physical Review Research*, vol. 3, no. 3, p. 033205, 2021.
 98. B. Brai Orrs, M. Weyrauch, and M. V. Rakov, “Phase diagrams of one-, two-, and three-dimensional quantum spin systems derived from entanglement properties,” *Quantum Information & Computation*, vol. 16, no. 9-10, pp. 885–899, 2016.
 99. M. S. Tepaske and D. J. Luitz, “Three-dimensional isometric tensor networks,” *Physical Review Research*, vol. 3, no. 2, p. 023236, 2021.
 100. P. C. G. Vlaar and P. Corboz, “Efficient tensor network algorithm for layered systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 130, p. 130601, Mar 2023.
 101. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, “Doping a mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 78, pp. 17–85, Jan 2006.

102. O. Dutta, M. Gajda, P. Hauke, M. Lewenstein, D.-S. Lühmann, B. A. Malomed, T. Sowiński, and J. Zakrzewski, “Non-standard hubbard models in optical lattices: a review,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 78, p. 066001, may 2015.
103. M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(De), and U. Sen, “Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond,” *Advances in Physics*, vol. 56, no. 2, pp. 243–379, 2007.
104. A. Micheli, G. K. Brennen, and P. Zoller, “A toolbox for lattice-spin models with polar molecules,” *Nature Physics*, vol. 2, no. 5, pp. 341–347, 2006.
105. J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands,” *Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A*, vol. 276, 11 1963.
106. M. C. Gutzwiller, “Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 10, pp. 159–162, Mar 1963.
107. J. Kanamori, “Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 30, pp. 275–289, 09 1963.
108. “The Hubbard model at half a century, journal=Nature Physics,” vol. 9, pp. 523–523, Sep 2013.
109. L. M. Roth, “Simple narrow-band model of ferromagnetism due to intra-atomic exchange,” *Phys. Rev.*, vol. 149, pp. 306–308, Sep 1966.
110. A. M. Oleś, “Antiferromagnetism and correlation of electrons in transition metals,” *Phys. Rev. B*, vol. 28, pp. 327–339, Jul 1983.
111. H. J. Schulz, “Effective action for strongly correlated fermions from functional integrals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, pp. 2462–2465, Nov 1990.
112. S. Robaszkiewicz and B. R. Bułka, “Superconductivity in the Hubbard model with pair hopping,” *Physical Review B*, vol. 59, pp. 6430–6437, mar 1999.
113. W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, and G. Rajagopal, “Quantum Monte Carlo simulations of solids,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 73, pp. 33–83, Jan 2001.
114. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, “Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 68, pp. 13–125, Jan 1996.
115. C. Lanczos, “A Precision Approximation of the Gamma Function,”

- Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics Series B Numerical Analysis*, vol. 1, no. 1, pp. 86–96, 1964.
116. L. Landau and E. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Course of Theoretical Physics, Elsevier Science, 1981.
117. S. Bravyi, D. P. DiVincenzo, and D. Loss, “Schrieffer–wolff transformation for quantum many-body systems,” *Annals of physics*, vol. 326, no. 10, pp. 2793–2826, 2011.
118. F. D. M. Haldane, “Continuum dynamics of the 1-d heisenberg anti-ferromagnet: Identification with the $o(3)$ nonlinear sigma model,” *Physics letters a*, vol. 93, no. 9, pp. 464–468, 1983.
119. F. D. M. Haldane, “Nonlinear field theory of large-spin heisenberg anti-ferromagnets: semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis néel state,” *Physical review letters*, vol. 50, no. 15, p. 1153, 1983.
120. I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, “Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 115, no. 3, pp. 477–528, 1988.
121. I. Affleck, “Quantum spin chains and the haldane gap,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 1, no. 19, p. 3047, 1989.
122. X. Chen, Z.-C. Gu, Z.-X. Liu, and X.-G. Wen, “Symmetry protected topological orders and the group cohomology of their symmetry group,” *Physical Review B*, vol. 87, no. 15, p. 155114, 2013.
123. Z.-C. Gu and X.-G. Wen, “Tensor-entanglement-filtering renormalization approach and symmetry-protected topological order,” *Physical Review B*, vol. 80, no. 15, p. 155131, 2009.
124. F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, “Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 064439, Feb 2010.
125. S. Rachel, “Interacting topological insulators: a review,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 81, p. 116501, oct 2018.
126. T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M. PA Fisher, “Deconfined criticality critically defined,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 74, no. Suppl, pp. 1–9, 2005.
127. S. Sachdev and D. Chowdhury, “The novel metallic states of the cuprates: Topological fermi liquids and strange metals,” *Progress of Theoretical and*

- Experimental Physics*, vol. 2016, p. 12C102, Dec 2016.
128. M. Koashi and A. Winter, “Monogamy of quantum entanglement and other correlations,” *Physical Review A*, vol. 69, no. 2, p. 022309, 2004.
 129. H. L. Stormer, D. C. Tsui, and A. C. Gossard, “The fractional quantum hall effect,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 71, pp. S298–S305, Mar 1999.
 130. R. O. Jones, “Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future,” *Reviews of modern physics*, vol. 87, no. 3, p. 897, 2015.
 131. G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, “Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 78, pp. 865–951, Aug 2006.
 132. R. Moessner and J. T. Chalker, “Properties of a classical spin liquid: The heisenberg pyrochlore antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, pp. 2929–2932, Mar 1998.
 133. L. Savary and L. Balents, “Quantum spin liquids: a review,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 80, no. 1, p. 016502, 2016.
 134. T. Chanda, R. Kraus, G. Morigi, and J. Zakrzewski, “Self-organized topological insulator due to cavity-mediated correlated tunneling,” *Quantum*, vol. 5, p. 501, 2021.
 135. D. Chowdhury, A. Georges, O. Parcollet, and S. Sachdev, “Sachdev-yekitaev models and beyond: Window into non-fermi liquids,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 94, no. 3, p. 035004, 2022.
 136. P. Francesco, P. Mathieu, and D. Sénéchal, *Conformal field theory*. Springer Science & Business Media, 2012.
 137. P. Calabrese and J. Cardy, “Entanglement entropy and conformal field theory,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 42, p. 504005, dec 2009.
 138. I. Niesen and P. Corboz, “Emergent haldane phase in the $s=1$ bilinear-biquadratic heisenberg model on the square lattice,” *Physical Review B*, vol. 95, no. 18, p. 180404, 2017.
 139. S.-J. Ran, E. Tirrito, C. Peng, X. Chen, G. Su, and M. Lewenstein, “Review of tensor network contraction approaches,” *arXiv preprint arXiv:1708.09213*, 2017.
 140. A. M. Ali, I. P. Delgado, and A. M. F. de Leceta, “Traveling salesman problem from a tensor networks perspective,” 2023.

141. S. Kourtis, C. Chamon, E. Mucciolo, and A. Ruckenstein, “Fast counting with tensor networks,” *SciPost Physics*, vol. 7, no. 5, p. 060, 2019.
142. J.-G. Liu, L. Wang, and P. Zhang, “Tropical tensor network for ground states of spin glasses,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 126, p. 090506, Mar 2021.
143. L. Richter, L. Sallandt, and N. Nüsken, “Solving high-dimensional parabolic pdes using the tensor train format,” 2021.
144. E. Stoudenmire and D. J. Schwab, “Supervised learning with tensor networks,” *Advances in neural information processing systems*, vol. 29, 2016.
145. J. I. Latorre, “Image compression and entanglement,” 2005.
146. R. Penrose *et al.*, “Applications of negative dimensional tensors,” *Combinatorial mathematics and its applications*, vol. 1, pp. 221–244, 1971.
147. J. Maldacena, “The large- n limit of superconformal field theories and supergravity,” *International journal of theoretical physics*, vol. 38, no. 4, pp. 1113–1133, 1999.
148. G. Vidal, “Entanglement renormalization,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 220405, Nov 2007.
149. B. Swingle, “Constructing holographic spacetimes using entanglement renormalization,” *arXiv preprint arXiv:1209.3304*, 2012.
150. R. Sahay, M. D. Lukin, and J. Cotler, “Emergent holographic forces from tensor networks and criticality,” *arXiv preprint arXiv:2401.13595*, 2024.
151. H. N. Phien, I. P. McCulloch, and G. Vidal, “Fast convergence of imaginary time evolution tensor network algorithms by recycling the environment,” *Physical Review B*, vol. 91, no. 11, p. 115137, 2015.
152. J. Tindall and M. Fishman, “Gauging tensor networks with belief propagation,” *SciPost Physics*, vol. 15, no. 6, p. 222, 2023.
153. M. Lubasch, J. I. Cirac, and M.-C. Banuls, “Unifying projected entangled pair state contractions,” *New Journal of Physics*, vol. 16, no. 3, p. 033014, 2014.
154. M. P. Zaletel, R. S. Mong, C. Karrasch, J. E. Moore, and F. Pollmann, “Time-evolving a matrix product state with long-ranged interactions,” *Physical Review B*, vol. 91, no. 16, p. 165112, 2015.
155. H. J. Liao, Z. Y. Xie, J. Chen, Z. Y. Liu, H. D. Xie, R. Z. Huang, B. Normand, and T. Xiang, “Gapless spin-liquid ground state in the $s = 1/2$ kagome antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 118, p. 137202, Mar 2017.

156. W. Lan and G. Evenbly, “Reduced contraction costs of corner-transfer methods for peps,” *arXiv preprint arXiv:2306.08212*, 2023.
157. M. Rader and A. M. Läuchli, “Finite correlation length scaling in lorentz-invariant gapless ipeps wave functions,” *Physical Review X*, vol. 8, no. 3, p. 031030, 2018.
158. V. Unukovych and A. Sotnikov, “Anisotropy-driven magnetic phase transitions in $su(4)$ -symmetric fermi gas in three-dimensional optical lattices,” *arXiv preprint arXiv:2403.04319*, 2024.
159. A. Kshetrimayum, M. Goihl, D. M. Kennes, and J. Eisert, “Quantum time crystals with programmable disorder in higher dimensions,” *Phys. Rev. B*, vol. 103, p. 224205, Jun 2021.
160. J. Dziarmaga, “Simulation of many-body localization and time crystals in two dimensions with the neighborhood tensor update,” *Phys. Rev. B*, vol. 105, p. 054203, Feb 2022.