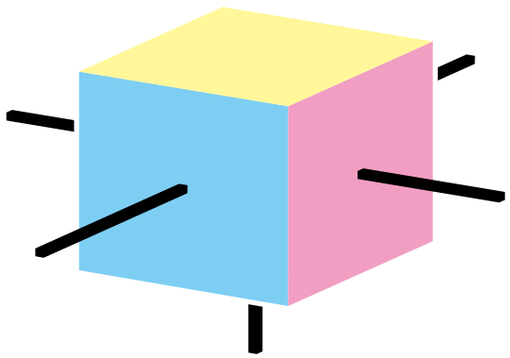


TeNeS

Tensor Network Solver for Quantum Lattice Systems

https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/tenes

https://github.com/issp-center-dev/TeNeS

YM and et al., Comput. Phys. Commun. 279, 108437 (2022)

質問・要望は
GitHub のissue か
メール (tenes-dev@issp.u-tokyo.ac.jp)へ！

Yuichi Motoyama (ISSP)

2023-11-20
for TeNeS ver 2.0.0

TeNeS 開発チーム

- **大久保 毅**（東大院理）
- **森田 悟史**（東大物性研）
- **本山 裕一**（東大物性研）
- **吉見 一慶**（東大物性研）
- **加藤 岳生**（東大物性研）
- **川島 直輝**（東大物性研）

TeNeS の特徴

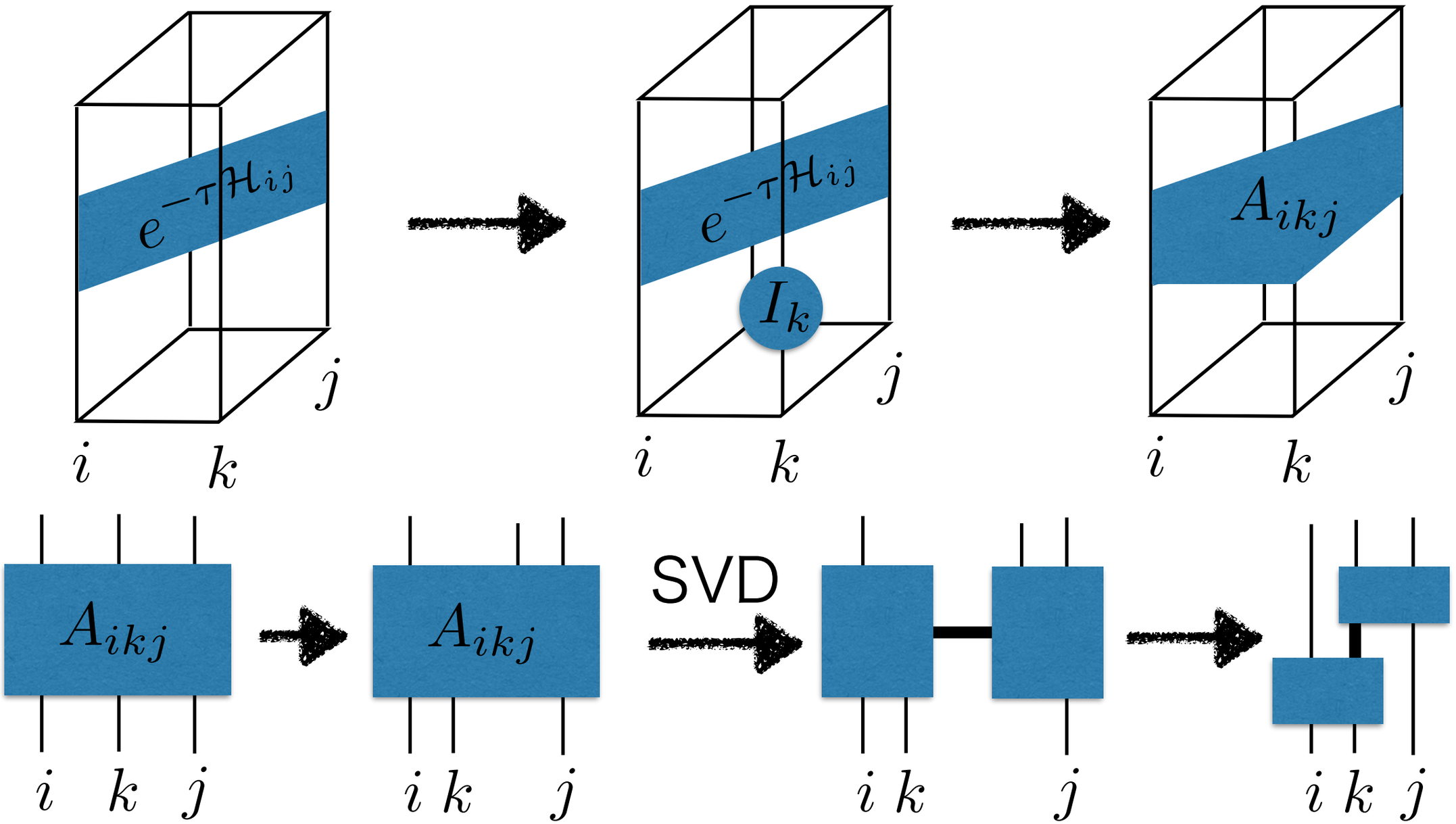
- **二次元量子格子模型の計算**を行うソフトウェア
  - **正方格子上のテンソルネットワーク (TN)** で波動関数と密度行列を表現
  - 周期構造を仮定することで無限系を計算する **(iTPS/iTPO)**
    - 無限系の縮約には**CTMRG** または**平均場環境**を利用する
  - **基底状態計算** $|\Psi\rangle \propto \lim_{\beta\to\infty} e^{-\beta\mathcal{H}}|\phi\rangle = \lim_{n\to\infty}\left(e^{-\tau\mathcal{H}}\right)^n|\phi\rangle$
    - 波動関数に虚時間発展演算子をかけていくことで基底状態を得る
    - 最後に物理量測定
  - **実時間発展** $|\Psi(T)\rangle \propto e^{-iT\mathcal{H}}|\Psi(0)\rangle = \left(e^{-i(T/n)\mathcal{H}}\right)^n|\Psi(0)\rangle$
    - 波動関数に実時間発展演算子をかけながら物理量を測定
  - **有限温度計算** $\rho(\beta) = e^{-(\beta/2)\mathcal{H}}\mathbb{1}e^{-(\beta/2)\mathcal{H}} = \left[e^{-(\tau/2)\mathcal{H}}\right]^n \mathbb{1}\left[e^{-(\beta/2)\mathcal{H}}\right]^n$
    - 密度行列に虚時間発展演算子をかけていくことで有限温度密度行列を得る
  - 時間発展演算子をかける操作には **simple update (SU)** と **full update (FU)** を利用

TeNeS の特徴

- ハミルトニアン
  - 正方格子上の任意の短距離2サイト相互作用を計算可能
    - 現状はx, y 方向にそれぞれ3サイト先まで
      - 正方格子の4x4 に収まる範囲内
    - 相互作用の形を工夫することで**正方格子以外も計算可能**
      - 例：正方格子の斜め方向に入れて三角格子
  - フェルミオン系は対象外（スピン系・ボソン系のみ）
- 物理量測定
  - 正方格子4x4 に収まる範囲内の演算子
  - x, y 軸方向に平行な向きの2点相関関数
  - 相関長
- テンソル演算には **mptensor** (https://github.com/smorita/mptensor)を利用
  - MPI 実行するだけで ScaLAPACK を利用した分散メモリ並列がなされる

TeNeS の特徴

- TeNeS のITE は簡単のために正方格子最近接ボンドのみ扱う
  - 長距離ITE テンソルは正方格子最近接 ITE テンソルの積に変換しておく



TeNeS の特徴

- よく使われそうな模型・格子は定義済み
  - 模型や格子のパラメータを与えるだけで良い
  - 模型
    - 量子スピン模型（スピンの大きさ Sは任意）

$$\mathcal{H} = \sum_{i<j} \left[\left(\sum_{\alpha}^{x,y,z} J_{ij}^{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} \right) + B_{ij} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right)^2 \right] - \sum_i \left[\sum_{\alpha}^{x,y,z} h^{\alpha} S_i^{\alpha} + D \left(S_i^z \right)^2 \right]$$

    - Bose-Hubbard 模型（サイトの粒子数カットオフ付き）

$$\mathcal{H} = \sum_{i<j} \left[-t_{ij} \left(b_i^{\dagger} b_j + \mathrm{h.c} \right) + V_{ij} n_i n_j \right] + \sum_i \left[U \frac{n_i (n_i - 1)}{2} - \mu n_i \right]$$

TeNeS の特徴

- よく使われそうな模型・格子は定義済み
  - 模型や格子のパラメータを与えるだけで良い
  - 格子
    - 格子回転異方性や最近接・2次近接・3次近接相互作用を導入可能
    - 正方格子
    - 三角格子
    - 蜂の巣格子
    - カゴメ格子

TeNeS の目標

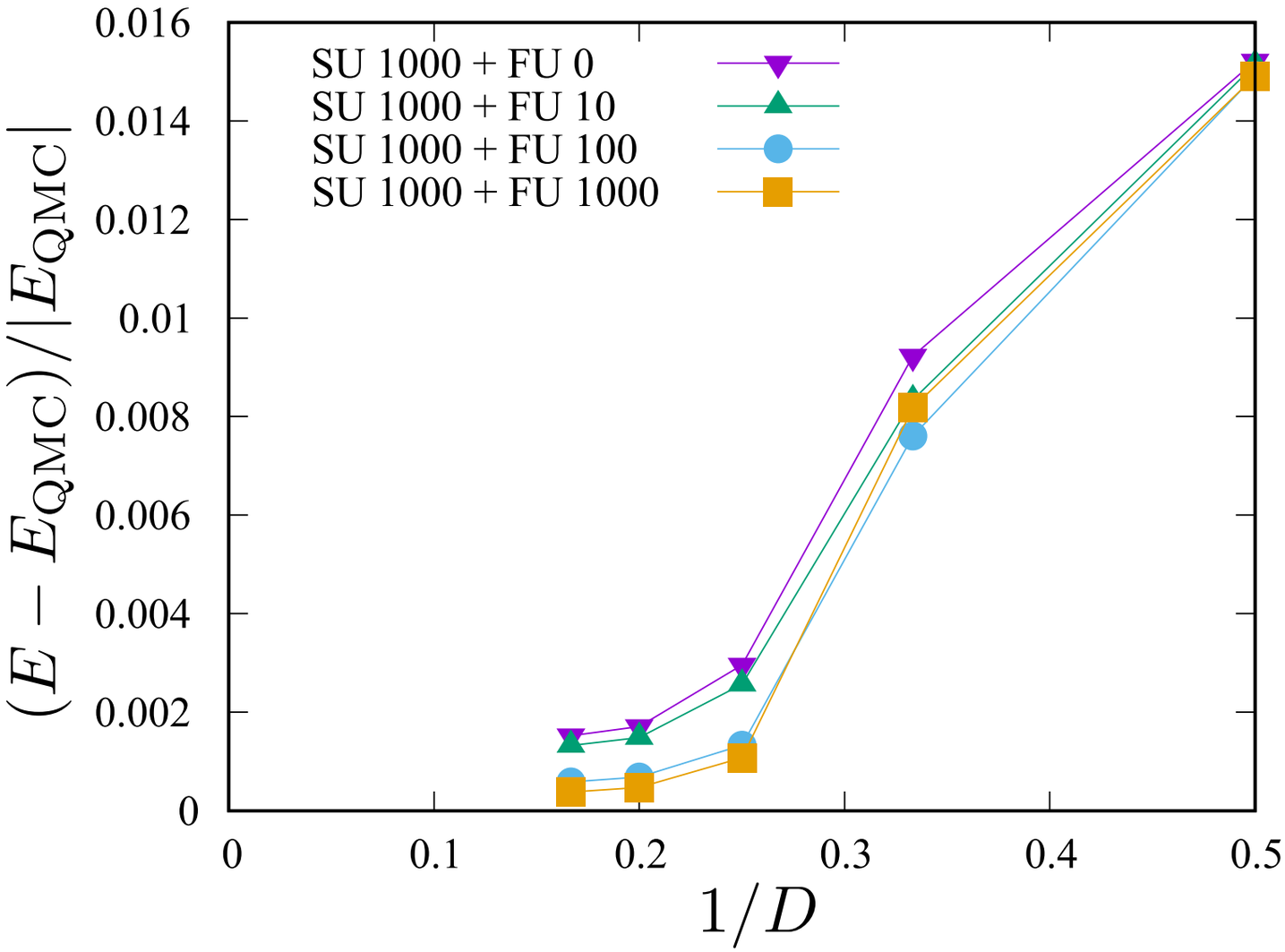
- 量子格子模型におけるテンソルネットワーク法研究への参入障壁を下げる
  - TN 法のアルゴリズム・プログラム開発
    - テンソル演算のライブラリはそれぞれの言語で多数存在
    - アルゴリズムも（ダイアグラム表記のおかげで）割とわかりやすい
    - 実際に1から組み上げるのは結構難しい（つらい）
      - テンソルの添字の順番など、システマティックに構築しないとすぐに混乱する
      - 複数のテンソルを縮約する場合、順番によって計算量オーダーが変わる
- 計算結果をどう評価するか？
  - ボンド次元など、ハイパーパラメータが結構多い
- **TeNeS をベンチマークとして用いる！**
  - 計算結果の比較
  - ソースコードを読む・TeNeS をベースに新アルゴリズムを入れる
    - GNU GPL v3 であることに留意

TeNeS の目標

- 量子格子模型におけるテンソルネットワーク法研究への参入障壁を下げる
  - 別の分野の研究者
    - 実験家
      - 実験データのフィッティングなど
    - TN 以外の手法開発者
      - TN 法との比較のために使う
- 使いやすさや汎用性を重視
  - 特定の模型や格子に強く依存した最適化はしない
  - 常に正方格子iTPS として扱う
- **「とりあえずTN 計算を試してみる」ができるようにする**

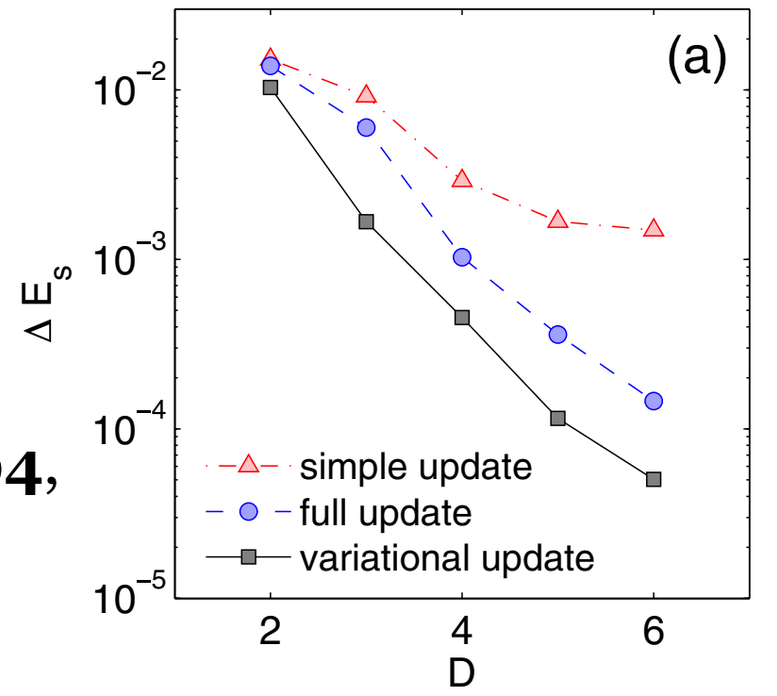
計算例：正方格子S=1/2反強磁性ハイゼンベルグ模型のエネルギー

- 正方格子S=1/2反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底エネルギー
- 横軸はボンド次元の逆数
- 縦軸はQMC による見積もりからの相対誤差



- A.W. Sandvik, AIP Conf. Proc. **1297**, 135 (2010)

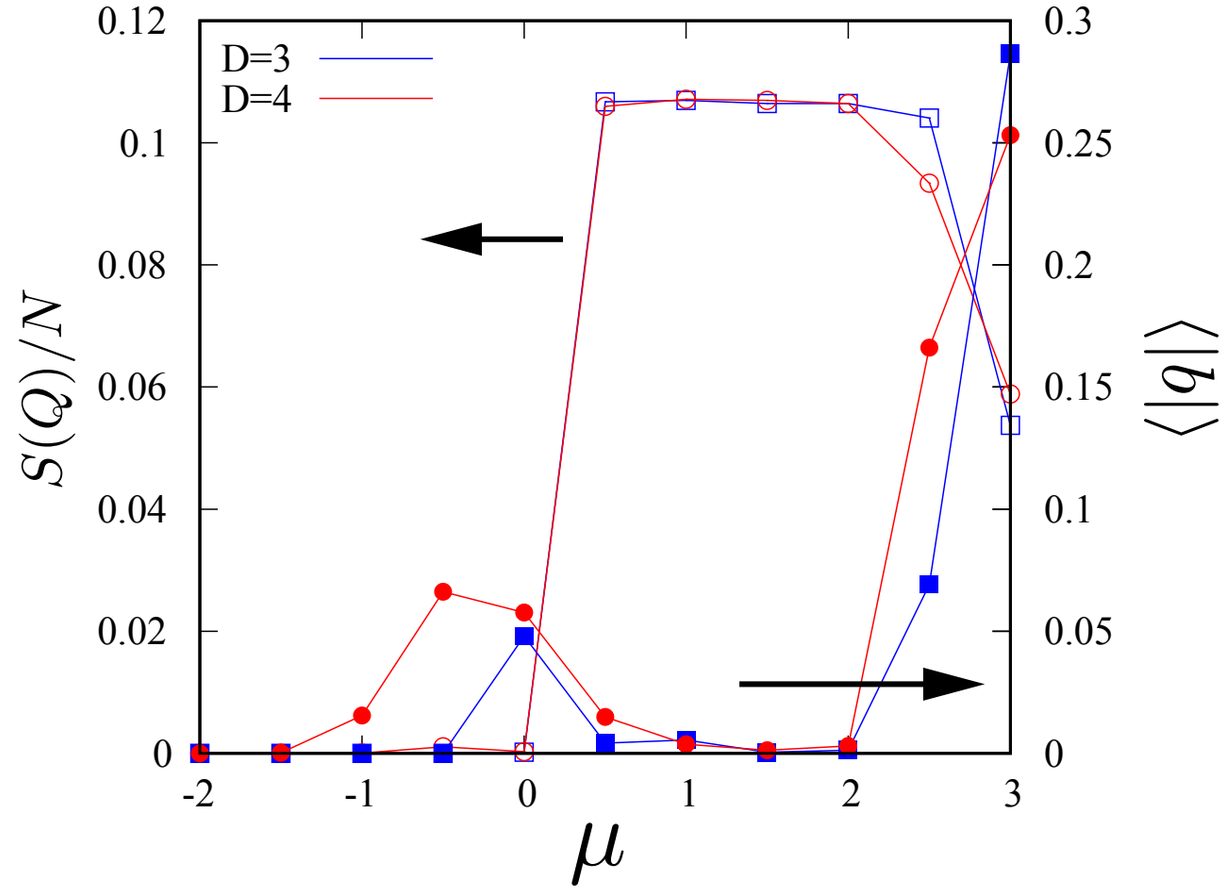
- ユニットセルの大きさは2×2
- $\chi = D^2$
- 24CPU の計算機で数時間程度

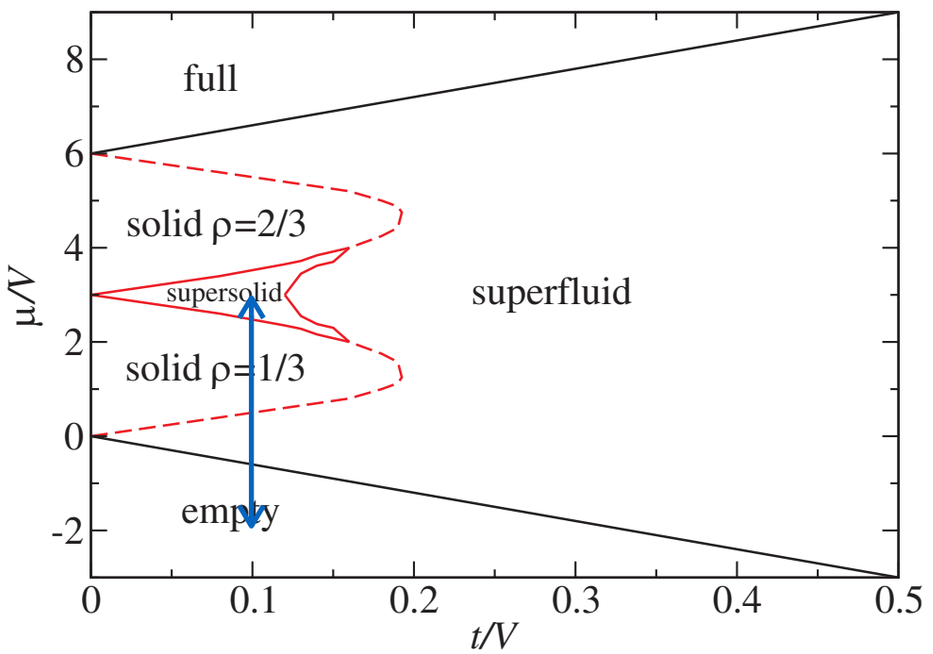


P. Corboz, PRB **94**, 035133 (2016)

計算例：三角格子ハードコアボースハバード模型

- 1/3 相と 2/3 相の間に超固体相がある
  - 超流動性と固体性が同時に存在
- t=0.1, V=1.0
- D=3 および D=4
- $\chi = D^2$
- ユニットセルは 3×3
- SU 2000 step, FU なし
- 構造因子S(Q)（左軸） と超流動オーダー|b|（右軸）
  - Q は√3×√3 オーダーの波数
- 先行研究(QMC) と矛盾しない結果





Wessel and Troyer, PRL 95, 127205 (2005)

前回講習会のバージョンからの差分

- 前回の講習会（2022-11-20）は TeNeS v1.3.1 だった
- そこからの主な更新
  - 実時間発展
  - 有限温度計算

TeNeS のつかいかた・準備編

インストール

TeNeS の使い方 -- 前準備

- インストール済み環境を使う
  - **MateriApps LIVE!**
  - 物性研スパコン
- パッケージインストール
  - Debian のパッケージが利用可能
    - 詳しくはMALIVE! のサイトへ
- ソースからインストール
  - 次項・次次項

TeNeS の使い方 -- 前準備

- TeNeS に必要なもの
  - C++11 に対応したコンパイラが必要
    - よほど古い計算機でなければ問題ないはず
  - BLAS/LAPACK が必要
    - 分散並列をしたい場合は MPI, ScaLAPACK も必要
  - CMake3.6 が必要
    - 内部で依存ライブラリをダウンロードするために Git も必要
- 入力ファイル生成ツール (`tenes_simple`, `tenes_std`) に必要なもの
  - Python3
    - モジュールとして numpy, scipy, toml が必要

TeNeS の使い方 -- インストール

- TeNeS のダウンロード
  - https://github.com/issp-center-dev/TeNeS
    - リリースページから適当なバージョンのtar をダウンロード・展開
    - もしくは git clone
- TeNeS のインストール

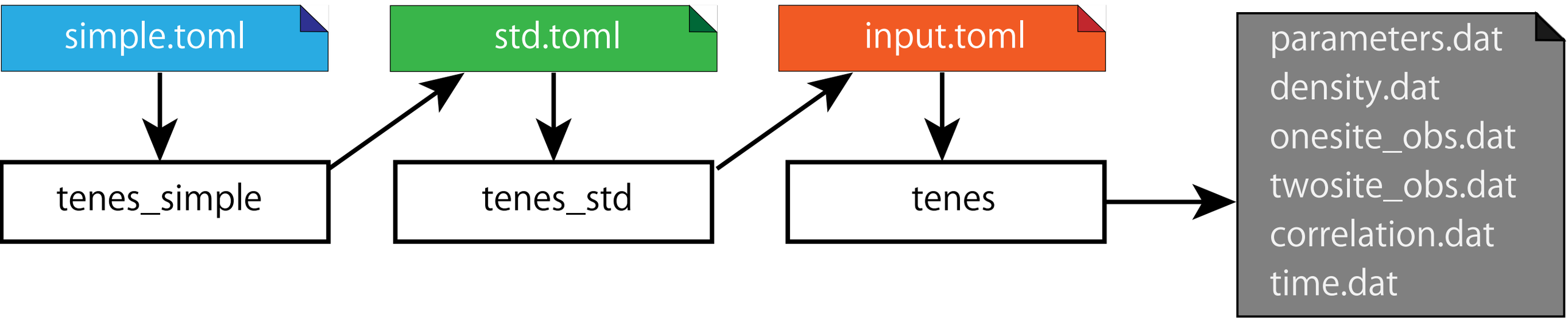
```
$ cd TeNeS                                  作業ディレクトリを作成・移動
$ mkdir build && cd build
$ cmake -DCMAKE_CXX_COMPILER=`which icpc` \↵                コンパイラの指定
        -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/opt/tenes \↵
        ../                                  インストール先の指定
$ make install
```

- $HOME/opt/tenes/bin に tenes, tenes_std, tenes_simple
- $HOME/opt/tenes/share 以下にサンプルファイル

TeNeS のつかいかた・基本編

シンプルモード (tenes_simple / simple.toml)を用いた定義済み模型・格子の基底状態計算

TeNeS の使い方 -- 実行フロー



- `tenes_simple (simple.toml → std.toml)`
  - **定義済み模型・格子のパラメータ**からハミルトニアンやユニットセル情報を生成するツール
- `tenes_std (std.toml → input.toml)`
  - ハミルトニアンやユニットセル情報からITE テンソルを生成するツール
  - 長距離ITE テンソルの分解も行われる
- `tenes (input.toml → output)`
  - 実際の計算を行うメインプログラム

TeNeS の使い方 -- シンプルモード

- 定義済みの模型・格子を計算する
  - テキストベースの単純な入力ファイル1つを用意すれば良い

例：正方格子S=1/2 反強磁性ハイゼンベルグ模型

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j$$

SU はτ=0.01 を1000ステップ

FU は行わない (0 ステップ)

角転送行列を使って縮約
角転送行列のボンド次元は16

正方格子
ユニットセルは2x2
ボンド次元は4

スピン系
S=1/2 （デフォルト）
反強磁性ハイゼンベルグ

```
[parameter]
[parameter.simple_update]
tau = 0.01        # SU の虚時間刻み
num_step = 1000   # SU のステップ数

[parameter.full_update]
tau = 0.01        # FU の虚時間刻み
num_step = 0      # FU のステップ数

[parameter.ctm]
meanfield_ctm = false # 縮約のしかた
dimension = 16    # ボンド次元 χ

[lattice]
type = "square lattice" # 正方格子
L = 2             # ユニットセルの長さ
W = 2             # ユニットセルの幅
initial = "antiferro" # 初期状態
virtual_dim = 4   # ボンド次元 D

[model]
type = "spin"     # スピン模型
J = 1.0           # 交換相互作用
```

例:S=1/2 正方格子反強磁性ハイゼンベルグ模型

```
$ tenes_simple simple.toml  # convert to std.toml
$ tenes_std std.toml        # convert to input.toml
$ tenes input.toml          # perform calculation
   ... 進捗報告 （省略） ...


Onesite observables per site:
  Sz          = 5.70170299863e-12 8.24461048345e-19
  Sx          = -1.93698629873e-08 -8.53148278222e-18
  Sy          = 3.12611410373e-08 -4.29087879573e-18
Twosite observables per site:
  hamiltonian = -0.667463006716 2.74670113479e-17
  SzSz        = -0.345269357812 -1.31655470664e-17
  SxSx        = -0.161096823276 -4.72116684558e-18
  SySy        = -0.161096825628 9.13209512715e-18
    Save elapsed times to output/time.dat
Wall times [sec.]:
  all           = 28.396518775
  simple update = 7.993189097
  full update   = 0
  environmnent  = 18.26470468
  observable    = 2.068691087

Done.
```

$E_{\mathrm{QMC}}/N = -0.6694422$

output ディレクトリには
サイトごとの物理量など、
もう少し詳細な出力ファイルが生成される

TeNeS の使い方 -- シンプルモード

- 定義済みの模型・格子を計算する
  - 模型

$$\mathcal{H} = \sum_{i<j}\left[\left(\sum_{\alpha}^{x,y,z} J_{ij}^{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha}\right) + B_{ij}\left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j\right)^2\right] - \sum_i \left[\sum_{\alpha}^{x,y,z} h^{\alpha} S_i^{\alpha} + D\left(S_i^z\right)^2\right]$$

    - スピン模型 `model.type = "spin"`
      - `J, Jx, Jy, Jz, hz, hx, ...`
    - Bose-Hubbard 模型 `model.type = "boson"`
      - `t, U, V, mu, ...`

$$\mathcal{H} = \sum_{i<j}\left[-t_{ij}\left(b_i^{\dagger} b_j + \mathrm{h.c}\right) + V_{ij} n_i n_j\right] + \sum_i \left[U\frac{n_i(n_i-1)}{2} - \mu n_i\right]$$

  - 格子
    - 正方格子 `lattice.type = "square"`
    - 三角格子 `lattice.type = "triangular"`
    - 蜂の巣格子 `lattice.type = "honeycomb"`
    - カゴメ格子 `lattice.type = "kagome"`
- その他各種パラメータについてはマニュアルを参照
  - https://issp-center-dev.github.io/TeNeS/manual/master/ja/html/index.html

TeNeS の使い方 -- シンプルモード

- 計算結果は output ディレクトリに出力される
  - parameter.general.output で変更可能
- onesite_obs.dat
  - 一体演算子の期待値（サイトごと）
- twosite_obs.dat
  - 二体演算子の期待値（ボンドごと）
- density.dat
  - 上記期待値のサイト平均
- correlation.dat
  - 相関関数
- correlation_length.dat
  - 相関長

TeNeS の使い方 -- シンプルモード

- onesite_obs.dat
  - 一体演算子の期待値（サイト毎)
  - 1列目：演算子番号
    - std.toml 中の observable.onesite セクションのgroup 番号
    - group=-1 は波動関数のノルム $\langle\Psi|\Psi\rangle$
  - 2列目：サイト番号
  - 3(4)列目: 期待値の実部（虚部)
  - スピン系
    . $\langle S_i^z \rangle$ (group=0), $\langle S_i^x \rangle$(group=1), $\left\langle S_i^y \right\rangle$(group=2, テンソルが複素の時)
  - ボース系
    . $\langle n_i \rangle$ (group=0), $\left\langle b_i^\dagger \right\rangle$(group=1), $\langle b_i \rangle$ (group=2)

```
0 0 8.0535140601528482e-09 0.0000000000000000e+00
0 1 8.0535125132578480e-09 0.0000000000000000e+00
0 2 8.0535127342428511e-09 0.0000000000000000e+00
0 3 8.0535117950565904e-09 0.0000000000000000e+00
1 0 4.9250956516679228e-01 0.0000000000000000e+00
1 1 4.9250956516679223e-01 0.0000000000000000e+00
   ... continue ...
```

TeNeS の使い方 -- シンプルモード

- `twosite_obs.dat`
  - 二体演算子の期待値（ボンド＝サイト対(source, target)）
  - 1列目：演算子番号
    - `std.toml` 中の `observable.twosite` セクションの`group` 番号
    - `group=-1` は波動関数のノルム $\langle\Psi|\Psi\rangle$
  - 2列目：source サイト番号
  - 3(4)列目: source サイトから見た target サイトの x(y) 座標
    - TeNeS ではサイトは正方格子として並んでいることに注意
  - 5(6)列目：期待値の実部（虚部）
- スピン系
  . ハミルトニアン (`group=0`), $\left\langle S_i^z S_j^z \right\rangle$(`group=1`), $\left\langle S_i^x S_j^x \right\rangle$(`group=2`), $\left\langle S_i^y S_j^y \right\rangle$(`group=3`)
- ボース系
  . ハミルトニアン (`group=0`), $\left\langle N_i N_j \right\rangle$ (`group=1`), $\left\langle b_i^\dagger b_j \right\rangle$(`group = 2`), $\left\langle b_i b_j^\dagger \right\rangle$ (`group=3`)

```
0 0 0 1 -7.60844868443655509e-01 0.00000000000000000e+00
0 0 1 0 -7.60253988759186927e-01 0.00000000000000000e+00
   ... continue ...
```

TeNeS の使い方 -- シンプルモード

- density.dat
  - onesite_obs, twosite_obs にある各種演算子のサイト平均
  - tenes を実行したときの標準出力にも出てくる

```
Sz          =  8.0535127567753402e-09  0.0000000000000000e+00
Sx          =  4.9250956516679228 5e-01  0.0000000000000000e+00
hamiltonian = -1.5214095258477358 1e+00  0.0000000000000000e+00
SzSz        =  4.3880830347358588 9e-02  0.0000000000000000e+00
SxSx        =  4.8870659160453561 2e-01  0.0000000000000000e+00
SySy        = -4.0709017908321050 4e-02  0.0000000000000000e+00
```

TeNeS の使い方 -- シンプルモード

- correlation.dat
  - 2つの1サイト演算子A,B の相関関数 $C(r) = \left\langle A(r_0)B(r+r_0) \right\rangle$
  - r は正方格子上の x, y 方向に沿った方向のみ計算可能
  - 入力で correlation セクションが定義されていない場合は計算しない
  - 1列目：Aの演算子番号
  - 2列目：Aのサイト番号(r0)
  - 3列目：Bの演算子番号
  - 4(5)列目：rのx(y)座標
  - 6(7)列目：期待値の実部（虚部）

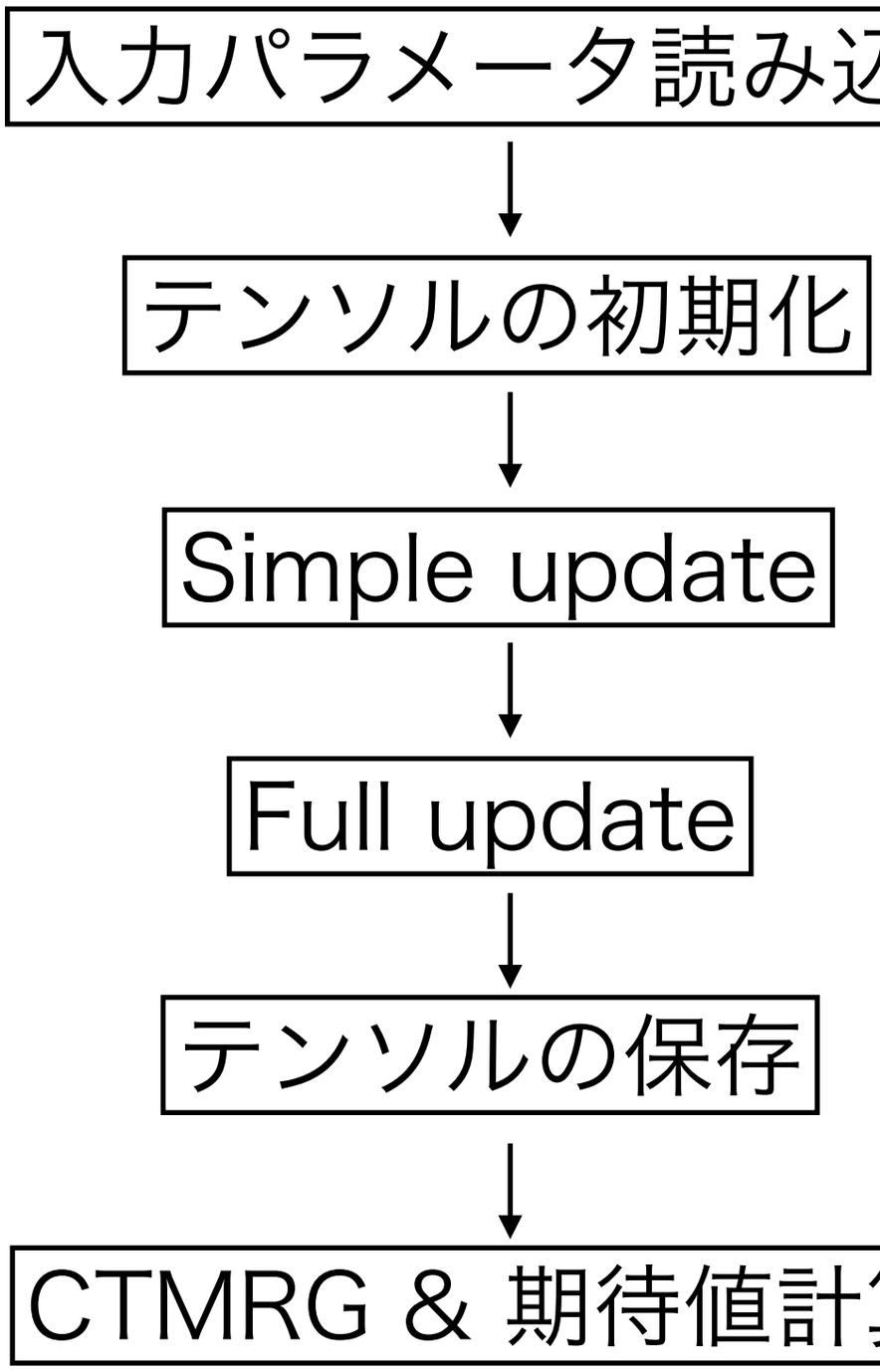
```
0 0 0 1 0 2.1489641089983579e-02 0.0000000000000000e+00
0 0 0 2 0 2.9308498958702314e-03 0.0000000000000000e+00
0 0 0 3 0 4.0556065544716687e-04 0.0000000000000000e+00
   ... continue ...
```

TeNeS の使い方 -- シンプルモード

- `correlation_length.dat`
  - （バルクテンソルの）相関長
    - 転送行列の固有値から計算される
  - 1列目：方向 (0: +x, 1: +y)
  - 2列目：y座標 or x座標
  - 3列目：相関長 $\xi = 1/e_1$
  - 4- 列目：固有値t_iの比 $e_i = -\log|t_i/t_0|$　$(t_0 \geq t_1 \geq \ldots)$

```
0 0 5.4735223329471327e-01 1.8269771075576586e+00 1.8853637635665336e+00
0 1 5.4735045507912372e-01 1.8269830429855809e+00 1.8853902655709473e+00
1 0 5.4950090592805767e-01 1.8198332144895917e+00 1.8777907759252053e+00
1 1 5.4950270415369617e-01 1.8198272591581268e+00 1.8777642481548304e+00
```

tenes（本体プログラム）の内部フロー



TeNeS のつかいかた・基本編2

シンプルモード (tenes_simple / simple.toml)を用いた定義済み模型・格子の実時間発展計算

実時間発展計算

- 基底状態計算とほとんど同じやりかたで実行可能
  - [parameter.general] セクションの mode パラメータを
    "time evolution" にすればよい
    - このパラメータのデフォルト値は "ground state" (基底状態計算)
    - "time" や "ground" と略記しても動きます
- 時間発展の初期状態テンソルは tensor_load で読み込む
  - 基底状態計算で tensor_save しておくのがよい
- measure_interval で測定頻度を指定
  - デフォルトは10
- num_step や tau を複数設定できる
  - 時間発展の刻み幅を変えられる

```
[parameter]
[parameter.general]
output = "output_te_strong"
tensor_load = "save_tensor"
mode = "time"

[parameter.simple_update]
num_step = 500
tau = 0.01

[parameter.full_update]
num_step = 0
tau = 0.0

[parameter.ctm]
meanfield_env = true
iteration_max = 10
dimension = 10

[lattice]
type = "square lattice"
L = 2
W = 2
virtual_dim = 3
initial = "ferro"

[model]
type = "spin"
Jz = -1.0
Jx = 0.0
Jy = 0.0
hx = 2.0
```

実時間発展計算

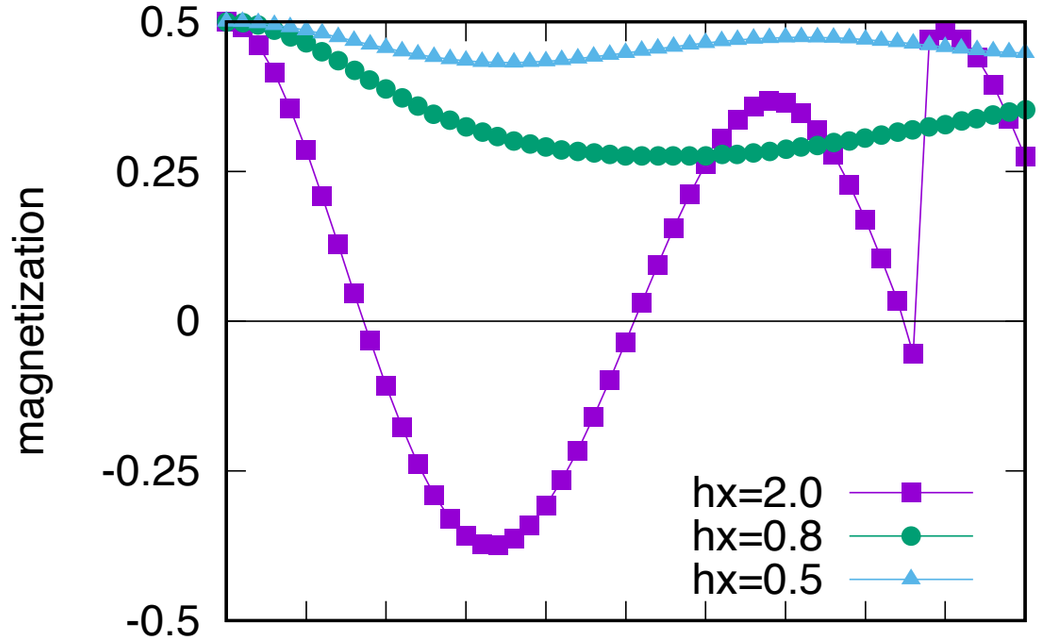
- 基底状態の出力と比較すると、時刻が付与される（1列目）
  - density.dat も時刻ごとに出力される

```
$ cat output/TE_density.dat

# The meaning of each column is the following:
# $1: time
# $2: observable ID
# $3: real
# $4: imag
# The meaning of observable IDs are the following:
# 0: Energy
# 1: Sz
# 2: Sx
# 3: Sy
# 4: bond_hamiltonian
# 5: SzSz
# 6: SxSx
# 7: SySy

0.0000000000000000e+00 0 -5.0018476405208 0e-01  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 1  4.9999994564652 8332e-01  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 2  9.2430648679719 9051e-05  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 3  2.3408893533734 9211e-06  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 4 -5.0018476405208 0e-01  2.4139581475698 8129e-21
0.0000000000000000e+00 5  4.9999990278825 1294e-01  4.4161986825117 7862e-22
0.0000000000000000e+00 6  1.1265358802016 5790e-05 -3.0170149156658 7424e-21
0.0000000000000000e+00 7 -1.1284019934167 3157e-05  1.8523446468939 2942e-21
9.9999999999999917e-02 0 -5.0018472559726 2125e-01  0.0000000000000000e+00
```

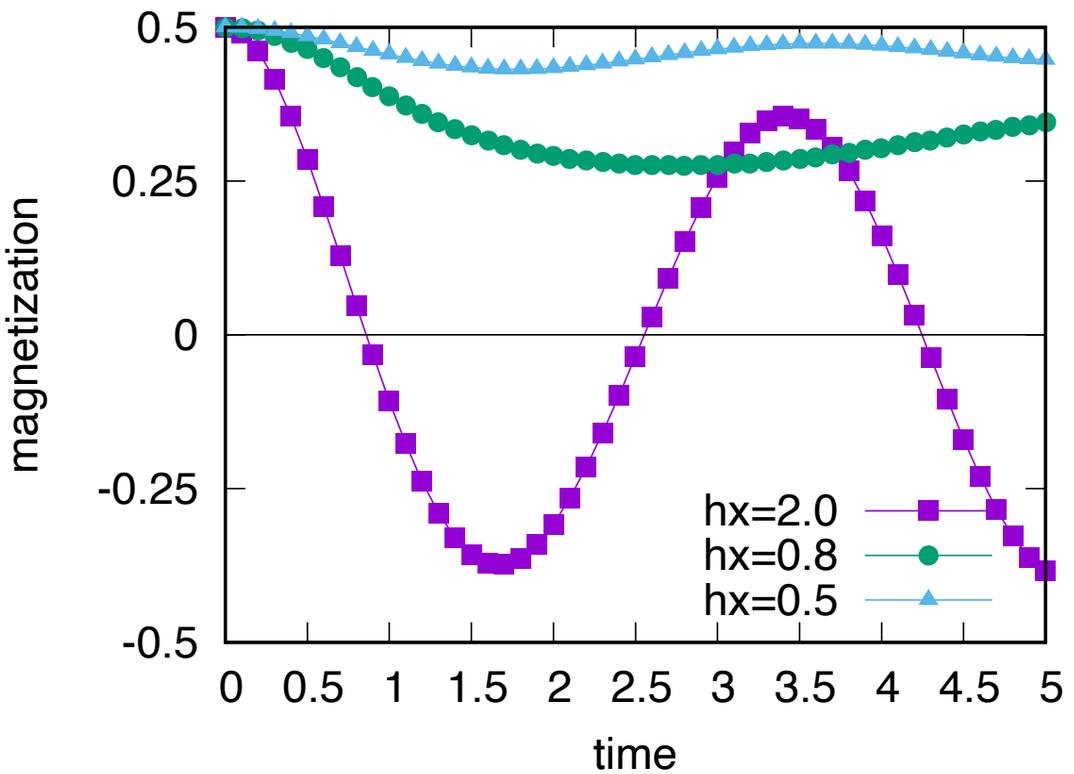
実時間発展計算

- 計算例（sample/02_time_evolution）
  - 横磁場イジング模型の実時間発展
  - 初期状態はMz=1/2 の強磁性状態
  - 横磁場によって縦磁化の大きさが時間とともに振動する
  - 横磁場の強さが量子相転移点 (hx ~ 1.5)を越えると縦磁化が0を超えて負になる
- 実時間発展はエンタングルメントが成長してTNの表現能力が不足しがち
  - D=3, hx=2.0, t=4.25 の飛び
  - ボンド次元を変えてみましょう

D=3



D=10



TeNeS のつかいかた・基本編3

シンプルモード (tenes_simple / simple.toml)を用いた定義済み模型・格子の有限温度計算

有限温度計算

- 基底状態計算とほとんど同じやりかたで実行可能
  - [parameter.general] セクションの mode パラメータを "finite temperature" にすればよい
    - このパラメータのデフォルト値は "ground state" (基底状態計算)
    - "finite" や "ground" と略記しても動きます
- 計算される逆温度の刻み幅は2τになるので注意
  - τの虚時間発展がブラとケット両方にかかる
- measure_interval で測定頻度を指定
  - デフォルトは10
- num_step や tau を複数設定できる
  - 逆温度の刻み幅を変えられる

```
[parameter]
[parameter.general]
mode = "finite"
is_real = false
output = "output_ft_strong"
measure_interval = [10, 10, 5]

[parameter.simple_update]
num_step = [50, 200, 10]
tau = [0.01, 0.005, 0.05]

[parameter.full_update]
num_step = 0
tau = 0.0

[parameter.ctm]
iteration_max = 10
dimension = 10

[lattice]
type = "square lattice"
L = 2
W = 2
virtual_dim = 3

[model]
type = "spin"
Jz = -1.0
Jx = 0.0
Jy = 0.0
hx = 2.0
```

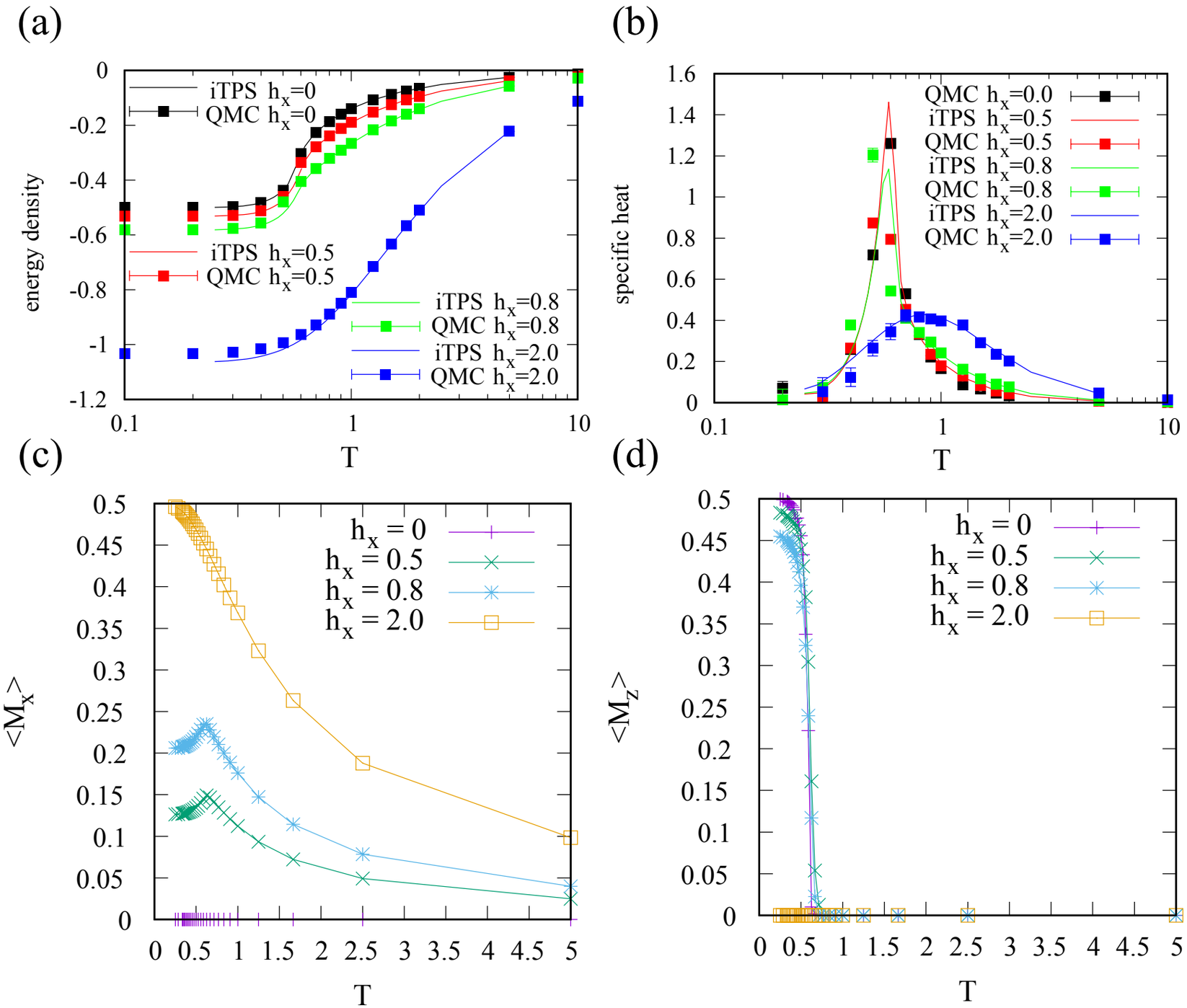
有限温度計算

- 基底状態の出力と比較すると、逆温度が付与される（1列目）
  - density.dat も温度ごとに出力される

```
$ cat output/FT_density.dat

# The meaning of each column is the following:
# $1: inverse temperature
# $2: observable ID
# $3: real
# $4: imag
# The meaning of observable IDs are the following:
# 0: Energy
# 1: Sz
# 2: Sx
# 3: Sy
# 4: bond_hamiltonian
# 5: SzSz
# 6: SxSx
# 7: SySy

0.0000000000000000e+00 0  0.0000000000000000e+00  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 1  0.0000000000000000e+00  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 2  0.0000000000000000e+00  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 3  0.0000000000000000e+00  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 4  0.0000000000000000e+00  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 5  0.0000000000000000e+00  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 6  0.0000000000000000e+00  0.0000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00 7  0.0000000000000000e+00  0.0000000000000000e+00
1.9999999999999983e-01 0 -2.2120422887979868le-01  0.0000000000000000e+00
```

有限温度計算

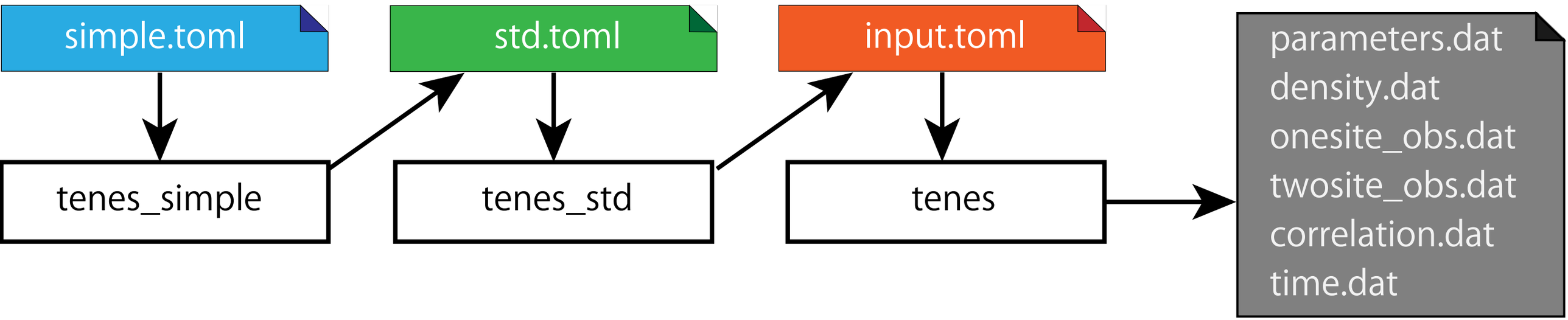
- 計算例（sample/03_finite_temperature）
  - 横磁場イジング模型
  - QMC計算と矛盾しない結果に
    - QMCの有限サイズ効果やTNの有限ボンド次元効果、CTMRGの収束の効果などはある
- S=1/2 なので古典スピンとは転移点が4倍ずれる



TeNeS のつかいかた・発展編

スタンダードモード (tenes_std/std.toml)を用いた格子・模型・演算子の定義

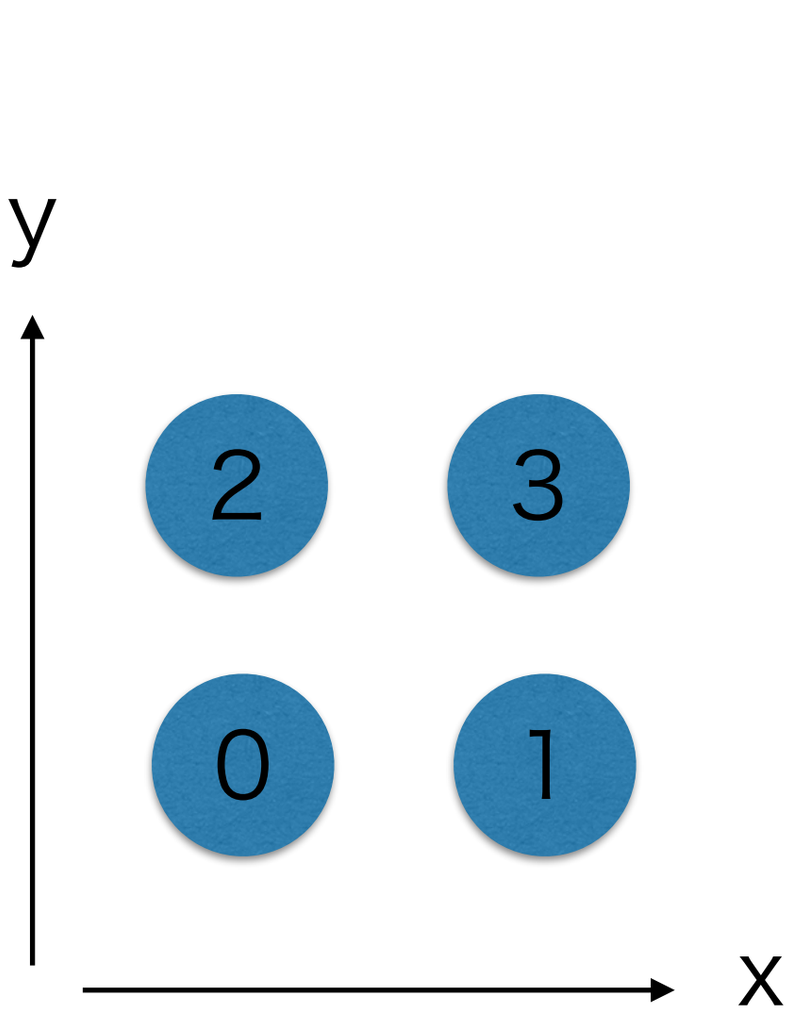
TeNeS の使い方 -- 実行フロー

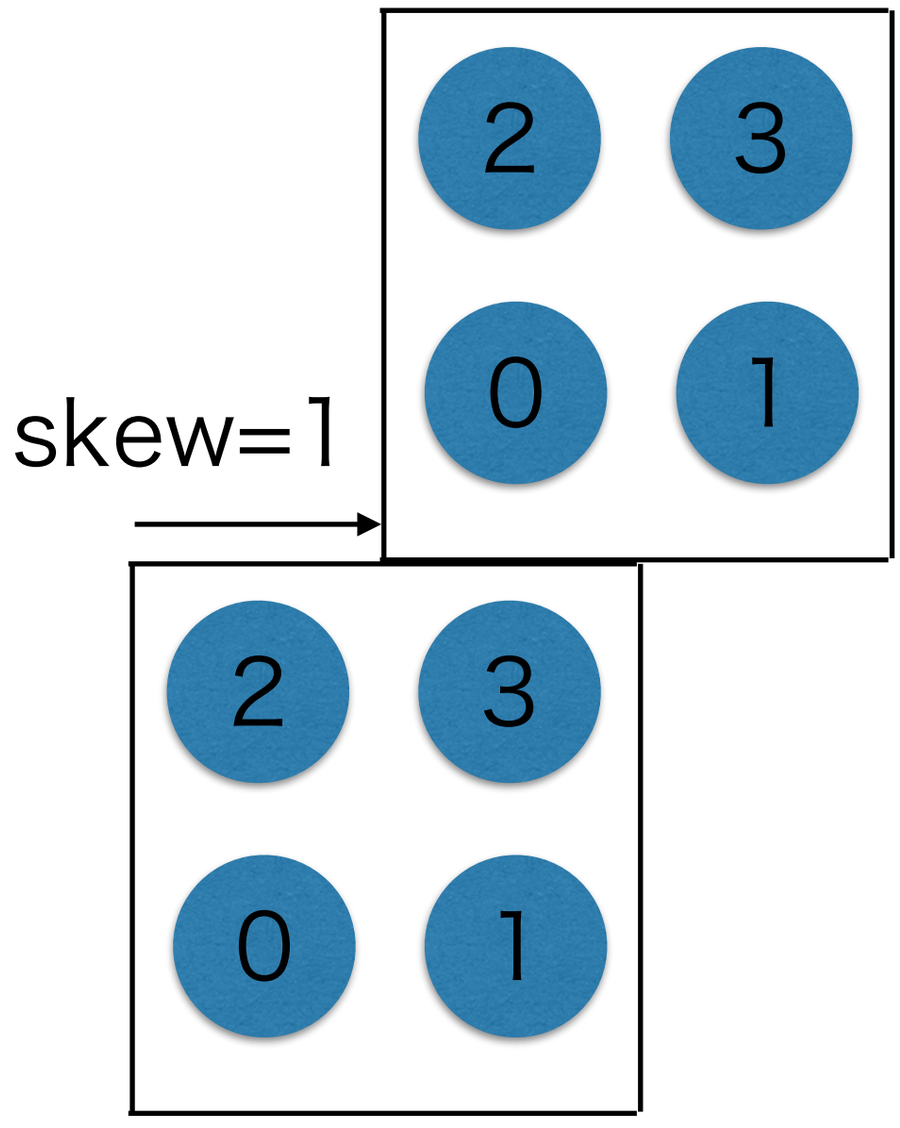


- `tenes_simple (simple.toml → std.toml)`
  - 定義済み模型・格子のパラメータからハミルトニアンやユニットセル情報を生成するツール
- `tenes_std (std.toml → input.toml)`
  - **ハミルトニアンやユニットセル情報**からITE テンソルを生成するツール
  - 長距離ITE テンソルの分解も行われる
- `tenes (input.toml → output)`
  - 実際の計算を行うメインプログラム

standard mode: ユニットセル

```
[tensor]
type = "square lattice"  # 無視される（simple.toml の名残）
L_sub = [2, 2]           # 2x2 unitcell
skew = 0                 # y 方向の境界を超えたときの x 方向のずれ
```





standard mode: ユニットセル

```
[[tensor.unitcell]]
virtual_dim = [4, 4, 4, 4]  # ボンド次元 （← ↑ → ↓ の順）
index = [0, 3]              # ユニットセル中のどのテンソルかを示す番号
physical_dim = 2            # 物理ボンドの次元
initial_state = [1.0, 0.0]  # 初期状態の係数
noise = 0.01                # 初期テンソルのゆらぎ

[[tensor.unitcell]]
virtual_dim = [4, 4, 4, 4]
index = [1, 2]
physical_dim = 2
initial_state = [0.0, 1.0]
noise = 0.01
```

全体の初期状態 ψ はサイトごとの初期状態 ψ_i の直積状態 $\left|\Psi\right\rangle = \bigotimes_i \left|\Psi_i\right\rangle$

ψ_i は、initial_state 配列の要素を前から a_0, a_1, ..., a_{d-1} とすると、

$$\left|\Psi_i\right\rangle \propto \sum_{k}^{d-1} a_k \left|k\right\rangle$$

standard mode: ハミルトニアン

TeNeS はハミルトニアンをサイトハミルトニアン（1サイトハミルトニアン）と
ボンドハミルトニアン（2サイトハミルトニアン）の和として考える

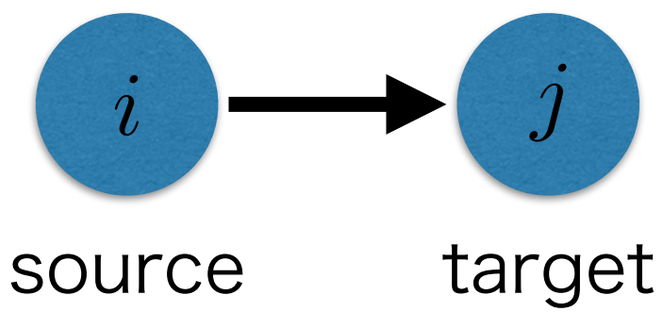
$$\mathcal{H} = \sum_{ij} \mathcal{H}_{ij} + \sum_{i} \mathcal{H}_{i}$$

これら局所ハミルトニアンは、その行列要素と作用するサイト・ボンドで規定する

行列要素を定義すれば模型を定義できる

ボンドを定義すれば格子を定義できる

ボンドは source サイトと target サイトの組であると考える



standard mode: ボンドハミルトニアン

std.toml でのボンドハミルトニアンの定義

```
[[hamiltonian]]
dim = [2, 2]    # 作用するボンド [source, target] の取りうる状態数の対
bonds = """     # 作用するボンドの集合（1行1ボンド）
0 1 0           # 1列目: ユニットセル内の source の番号
1 1 0           # 2列目: source からみた target の x 座標（変位）
2 1 0           # 3列目: source からみた target の y 座標（変位）
3 1 0
0 0 1
1 0 1
2 0 1
3 0 1
"""
```

▶次のページ

```
elements = """      # ハミルトニアンの（非ゼロな）行列要素（1行1要素）
0 0 0 0 0.25 0.0    # 1列目: 作用前の source の状態
1 0 1 0 -0.25 0.0   # 2列目: 作用前の target の状態
0 1 1 0 0.5 0.0     # 3列目: 作用後の source の状態
1 0 0 1 0.5 0.0     # 4列目: 作用後の target の状態
0 1 0 1 -0.25 0.0   # 5列目: 要素の実部
1 1 1 1 0.25 0.0    # 6列目: 要素の虚部
"""
```

▶次の次のページ

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

standard mode: ボンドハミルトニアン

ボンドハミルトニアンの作用するボンドの定義

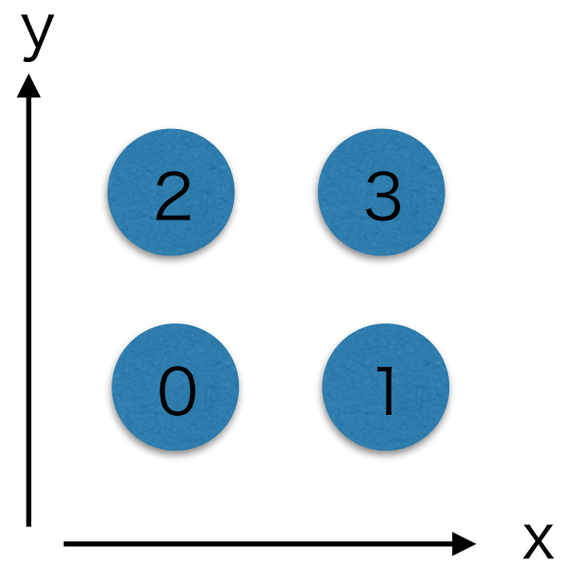
```
[[hamiltonian]]
dim = [2, 2]    # 作用するボンド [source, target] の取りうる状態数の対
bonds = """     # 作用するボンドの集合（1行1ボンド）
0 1 0           # 1列目: ユニットセル内の source の番号
1 1 0           # 2列目: source からみた target の x 座標（変位）
2 1 0           # 3列目: source からみた target の y 座標（変位）
3 1 0
0 0 1
1 0 1
2 0 1
3 0 1
"""
```

右のユニットセルの時

0 1 0 は 0 番と右隣(1) (x+=1, y+=0)

1 0 1 は 1 番と上隣(3) (x+=0, y+=1)

1 1 0 は 1 番と右隣（右のセルの0）



standard mode: ボンドハミルトニアン

ボンドハミルトニアン演算子の行列要素の定義

1列目：作用前の source site の状態

2列目：作用前の target site の状態

3列目：作用後の source site の状態

4列目：作用後の target site の状態

5列目：要素の実部

6列目：要素の虚部

```
elements = """
0 0 0 0  0.25 0.0
1 0 1 0 -0.25 0.0
0 1 1 0  0.5  0.0
1 0 0 1  0.5  0.0
0 1 0 1 -0.25 0.0
1 1 1 1  0.25 0.0
"""
```

例

0 0 0 0 0.25 0.0 は $\langle 00 | \mathcal{H}_b | 00 \rangle = 0.25$

0 1 1 0 0.5 0.0 は $\langle 10 | \mathcal{H}_b | 01 \rangle = 0.5$

standard mode: サイトハミルトニアン

std.toml でのサイトハミルトニアンの定義

```
[[hamiltonian]]
dim = 2      # 作用するサイトの取りうる状態数
sites = []   # 作用するサイトのリスト（空リストは全サイト）

elements = """  # ハミルトニアンの（非ゼロな）行列要素（1行1要素）
0 0 -0.5 0.0    # 1,2 列目: 作用する前後の状態
1 1  0.5 0.0    # 3,4 列目: 行列要素
"""
```

$-S_i^z$

行列要素の定義方法はボンドハミルトニアンの1サイト版

standard mode: 演算子

最終的に期待値を計算する演算子の定義

現在は1サイト演算子と 2サイト演算子を計算可能

エネルギー演算子 = ボンドハミルトニアンも改めて指定する必要がある

（tenes_std が0 番の演算子として自動でコピーしてくれる）

```
[observable]
[[observable.onesite]] # 1サイト演算子
name = "Sz"      # 名前
group = 1        # 1サイト演算子の識別番号
sites = []       # 1サイト演算子が作用するテンソルの番号（[] はすべてを意味する）
dim = 2          # 1サイト演算子の次元
elements = """   # 1サイト演算子行列の非ゼロ要素（1行1要素）
0 0 0.5 0.0
1 1 -0.5 0.0
"""
```

$$S^z = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.0 \\ 0.0 & -0.5 \end{pmatrix}$$

standard mode: 演算子

最終的に期待値を計算する演算子の定義

現在は1サイト演算子と 2サイト演算子を計算可能

エネルギー演算子 = ボンドハミルトニアンも改めて指定する必要がある

（tenes_std が0 番の演算子として自動でコピーしてくれる）

```
[[observable.twosite]]
name = "SzSz"    # 名前
group = 1        # 2サイト演算子の識別番号（1サイトとは独立）
dim = [2, 2]     # 次元
bonds = """      # 作用するボンド（サイト対）
0 1 0            # ボンドハミルトニアンと同様の書式
1 1 0
2 1 0
3 1 0
0 0 1
1 0 1
2 0 1
3 0 1
"""
ops = [1, 1]     # 1サイト演算子の直積で書ける場合、その識別番号
                 # 今回は "Sz" が1 番の1サイト演算子
                 # elements として行列要素を陽に書くことも可能
                 # （ボンドハミルトニアンと同様の書式）
```

$$S_i^z S_j^z$$

standard mode: まとめ

- tenes_std の入力ファイル (std.toml) を編集すると格子・模型を自作可能
  - ユニットセル（正方格子上に並ぶバルクテンソル）
  - ハミルトニアン（サイト・ボンド）
    - ボンドハミルトニアンのつながりで具体的な格子が定義される
- まずは tenes_simple の出力をいじるのがよい
  - 磁場項などの一体項はサイトハミルトニアンではなくボンドハミルトニアンに吸収されて出力される
    - --use-site-hamiltonian オプションをつけるとサイトハミルトニアンとして出力される