arXiv:2304.01551v4 [physics.comp-ph] 5 Aug 2023

# 用于 Kitaev 磁体的可微编程张量网络

Xing-Yu Zhang,[1,2] Shuang Liang,[1] Hai-Jun Liao,[1,3,*] Wei Li,[4,5,†] 和 Lei Wang[1,3,‡]

[1] *Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China* [2] *Department of Physics, University of Science and Technical of China, Beijing 100080, China* [3] *Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan, Guangdong 523808, China* [4] *Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China* [5] *CAS Center for Excellence in Topological Quantum Computation, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*

我们提出了一种通用计算框架，通过基于自动微分的梯度优化无限投影纠缠对态，研究无限二维晶格上量子自旋模型的基态性质。该方法利用变分均匀矩阵乘积态收缩具有元胞结构的无限张量网络，并引入自动微分来优化局域张量。我们将这一框架应用于 Kitaev 型模型，该模型包含复杂相互作用和相互竞争的基态。为评估该方法的准确性，我们将结果与 Kitaev 模型的精确解进行了比较，发现与以往基于虚时间投影的张量网络计算相比，该方法对多种可观测量的计算结果更为吻合。此外，通过找到变分能量低于以往研究结果的基态，我们为 $K$-Γ 模型相图中向列顺磁相和 18 位点构型的存在提供了有力证据。进一步地，在描述 Kitaev 材料 $\alpha$-$RuCl_3$，的现实 $K$-$J$-Γ-Γ′ 模型中，我们发现了非共线之字形基态。最后，我们还发现，抑制这种之字形态的临界面外磁场强度对应的相变磁场值低于以往有限圆柱计算所得的数值。该框架用途广泛，可用于快速扫描一大类量子自旋模型的相图。

## 目录

I. 引言 1

II. 方法 2
A. 无限投影纠缠对态变分形式 2
B. 张量网络收缩：VUMPS 4
1. 厄米变分均匀矩阵乘积态 5
2. 非厄米变分均匀矩阵乘积态 6
3. 大元胞变分均匀矩阵乘积态 7
C. 自动微分优化 9
1. 自动微分基础 9
2. VUMPS 基本算子 10
3. 技术说明 10

III. 应用 11
A. 纯 Kitaev 模型 12
B. Kitaev-Γ模型 12
C. $K$-$J$-Γ-Γ′模型 13

IV. 讨论 15

V. 致谢 15

A. 收敛与边界键维数 15

参考文献 16

* navy物理学@iphy.ac.cn
† w.li@itp.ac.cn
‡ wanglei@iphy.ac.cn

## 一、引言

Kitaev 模型是受挫磁体中的典型例子，它由蜂窝晶格上三种不同类型键的各向异性近邻伊辛相互作用构成。该模型的基态可以精确求解，并具有一种称为量子自旋液体（QSL）的新颖相 [1]。此外，随着现实材料中存在 Kitaev 相互作用这一设想的提出 [2], ，人们对 Kitaev 材料（如 $\alpha$-$RuCl_3$ ）进行了广泛研究 [3–7]。人们提出了多种具有不同耦合的自旋模型，例如 $K$-Γ模型和 $K$-$J$-Γ-Γ′ 模型，但对于哪种模型能够完整描述现实材料的低能性质，尚无共识 [3, 4, 8–14]。在热力学极限下数值研究这些自旋模型面临两大难题。其一，这些模型具有高度受挫性，导致量子蒙特卡罗方法出现符号问题。虽然可以使用张量网络算法来规避这一问题，但也可能产生另一个难题。在这些模型中，不同相互作用之间的竞争可能导致形成具有大晶胞的磁序。然而，由于一维（1D）张量网络（如密度矩阵重整化群（DMRG）算法）的表示能力受到现实限制，因此不易处理这类情况。尽管 DMRG算法能够将二维（2D）系统映射为一维系统，但受计算复杂度限制，可研究的圆柱几何宽度有限 [15–22]。因此，亟需一种替代方法，以求得具有受挫性且

自旋构型具有大晶胞特征的系统的基态。

为了在热力学极限下直接求解二维晶格模型，可以采用张量网络波函数 Ansatz，例如无限投影纠缠对态（iPEPS） [23]。此外，具有大晶胞的多位点 iPEPS 能够直接表示复杂的大规模构型波函数 [22, 24–27]。然而，在降低计算成本并提高精度的同时进行基态 iPEPS 计算，仍然面临两个障碍。

降低计算成本的一个障碍是对具有大晶胞的无限二维张量网络进行缩并。当前问题可以通过采用角转移矩阵重整化群 [28, 29](CTMRG) 和变分均匀矩阵乘积态 [30–32] (VUMPS) 算法来解决。这些方法通过引入边界环境，有效地缩并无限二维张量网络。二者存在两个显著差异。首先，CTMRG 与 VUMPS 的收缩顺序不同。其次，VUMPS 直接处理本征问题，而 CTMRG 则采用类似幂方法的迭代。将这两种技术无缝整合起来，为充分发挥各自优势提供了一条颇具吸引力且前景广阔的途径。

其计算成本随大晶胞扩展的晶胞尺寸呈线性增长。然而，CTMRG 和 VUMPS 的大晶胞版本都存在一些棘手问题，这一点仍难以令人满意。正如文献 [33], 所述，CTMRG 扩展具有迭代特性，与幂方法类似，可能会在一定程度上影响其收敛速度。此外，尚未确立最优近似缩并的一般原则。VUMPS 在大晶胞中的扩展 [34]不存在这类问题。但是，直到文献 [35], 大晶胞中出现的非厄米变换矩阵才得到充分认识并被妥善处理。更重要的是，先前工作仅在二维经典伊辛模型中，以 $2 \times 2$ 晶胞对大晶胞进行基准测试。它在量子系统和更大晶胞中的表现是否良好，尚不明确。

另一个障碍是无限投影纠缠对态在基态优化方面不够充分。在先前的工作中，通常采用虚时间演化（ITE）方法（包括简单更新 [36]或全更新方法 [37, 38], ）来更新无限投影纠缠对态。然而，由于能量键是分别更新的，通过这些方法得到的基态无限投影纠缠对态往往不够准确，受挫系统中尤为如此。

此外，虚时间演化方法的有效性很大程度上取决于无限投影纠缠对态的初始化，尤其是在大晶胞情况下。使用虚时间演化寻找非常规有序相的一般方法既费时又高度依赖人工经验。具体而言，首先模拟经典模型 [39], ，然后尝试通过大量精心挑选的无限投影纠缠对态初始化，在量子情形中寻找具有相同参数的相似构型，以用于大晶胞 [22, 40]。

可以利用可微编程技术对无限投影纠缠对态（iPEPS）进行基于梯度的优化。这种方法已被证明在自旋系统 [41–43], 中具有强大的性能，即使在受挫的 Kitaev 模型 [44, 45]中也是如此。与传统的基于梯度的张量方法相比 [46, 47], ，自动微分（AD）避免了繁琐的图求和。我们发现，对于获得 Kitaev 型受挫系统的基态而言，优化而非表征能力才是关键，因为与虚时间演化（ITE）相比，我们能够使用具有虚键 $D$ 的小得多的 iPEPS，获得精确的基态能量和正确的可观测量。原则上，一旦给定用于计算可观测量的前向算法，例如本文中的大晶胞 VUMPS，就可以立即获得计算复杂度处于相同量级的反向算法。但在实践中，我们需要精心设计反向算法，以确保数值稳定性和计算效率。

本文将研究适用于 Kitaev 型模型的大晶胞 iPEPS 张量网络波函数 Ansatz 及其可微编程优化方法。本研究的重点是在与其他方法维度相当的情况下，提升 iPEPS 的优化能力，尤其针对大晶胞构型，同时确保计算高效且不引入人为效应。

本文的组织结构如下。首先，第 II 节回顾热力学极限下基态 iPEPS 模拟的方法，以及大晶胞 VUMPS 的缩并算法和精心设计的自动微分优化方法。随后，第III 节介绍该方法在具有多种竞争相的 Kitaev 型系统中的应用。第 IV节讨论未来发展的潜在问题。

本文附有一个开箱即用的 Julia 软件包，用于实现可微的大晶胞 VUMPS 计算 [48, 49]。

## II. 方法

给定一个哈密顿量，我们将介绍一种利用 iPEPS 在热力学极限下求得基态波函数的方法。我们首先使用随机初始化的 iPEPS，通过缩并无限大的张量网络来计算能量。此缩并采用 VUMPS 算法及其大晶胞版本完成。随后，我们利用自动微分（AD）计算出的梯度优化能量，从而得到 iPEPS 基态。在此过程中，我们将介绍一种精心设计的 VUMPS 反向传播方法。

### A. 无限投影纠缠对态拟设

一般而言，要准确表示一个包含 $N$ 个格点、每个格点有 $d$ 个状态的系统的量子态，需要 ——

个 $d^N$ 参数，这给数值模拟带来了重大挑战，尤其是在 $N$ 较大时。幸运的是，纠缠面积律 [50] 表明，典型的量子基态比任意态的纠缠程度更低，因此可以用张量网络有效地进行参数化 [51, 52]。

无限矩阵乘积态（iMPS）和无限投影纠缠对态（iPEPS）分别是热力学极限下适用于一维和二维系统基态的有效试探态。它们由在无限晶格上周期性重复的局部张量组成。局部张量的图形表示法如图1所示，其中 $D$ 是虚拟键维数，相应的键进行缩并， $d$ 是物理腿的键维数。

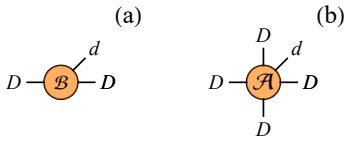
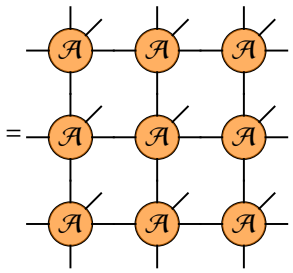



图 1：局部张量的图形表示法。在这种表示法中，每个实心图形（例如上方的圆形）代表一个张量，而它的每条腿（或键）代表张量的一个指标。

考虑正方晶格上晶胞内含有一个格点的二维平移不变系统，其基态可以用以下 iPEPS 参数化：

$$|\Psi(\mathrm{A})\rangle = \sum_{\{S_r\}} \mathrm{Tr} \prod_{\mathbf{r}} \mathrm{A}^{S_r}[\mathbf{r}]\, |\{S_r\}\rangle$$

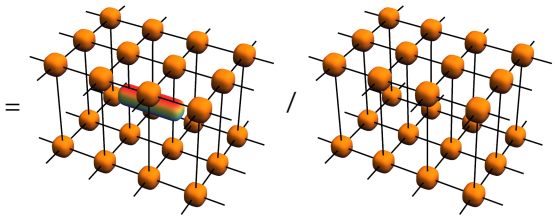



其中 $\mathrm{A}^{S_r}[\mathbf{r}]$ 为五阶局部张量，包含四条虚键和一条物理键。$|\{S_r\}\rangle = |S_{\mathbf{r}_1}, S_{\mathbf{r}_2}, \ldots, S_{\mathbf{r}_N}\rangle$ 是一个多基态，$\mathbf{r}_i$ 表示不同的晶格点。$\mathrm{Tr}[\ldots]$ 表示对所有虚键进行缩并。

能量期望值通过 fol- 计算。

下列方程：

$$E(\mathrm{A}) = \langle\Psi(\bar{\mathrm{A}})|H|\Psi(\mathrm{A})\rangle / \langle\Psi(\bar{\mathrm{A}})|\Psi(\mathrm{A})\rangle$$

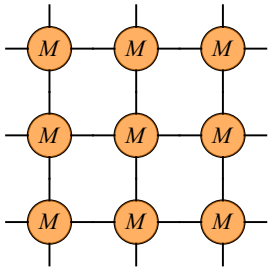



(1)

其中 $\bar{\mathrm{A}}$ 表示张量 A 的共轭，而  表示由最近邻相互作用项组成的哈密顿量张量。

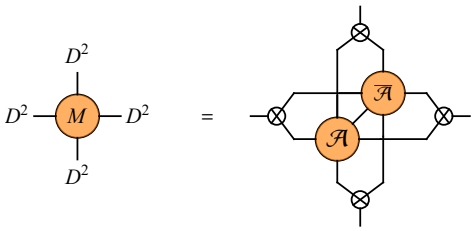
如公式（1）所示，为了对无限张量网络进行收缩，我们首先收缩垂直物理腿，并将虚拟键维数为 $D$ 的双层张量网络转换为虚拟键维数为 $D^2$ 的单层张量网络。例如，公式（1）中的分母变为

$$\langle\Psi(\bar{\mathrm{A}})|\Psi(\mathrm{A})\rangle =$$




(2)

其中 $M$ 为 A 与 A 的缩并：

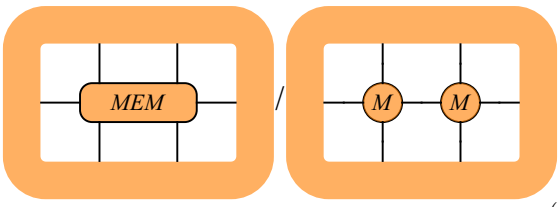



(3)

其中， $\otimes$ 表示将两个虚拟键合并为一个的外积运算。

然后我们引入有效边界环境，它近似表示围绕中心局部张量的二维无限张量网络。因此，式（1）可近似写为：

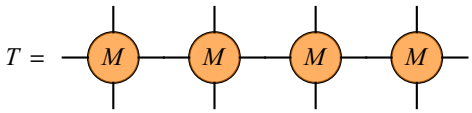
$$E = \frac{\langle\Psi(\bar{\mathrm{A}})|H|\Psi(\mathrm{A})\rangle}{\langle\Psi(\bar{\mathrm{A}})|\Psi(\mathrm{A})\rangle}$$



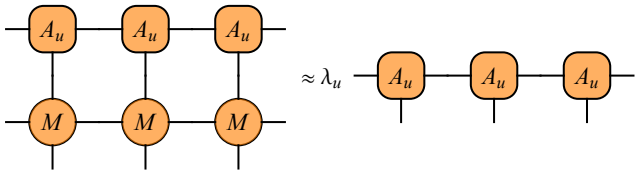

(4)

其中，A 张量与哈密顿量的缩并张量  记作 $MEM$。

在方程（4）中寻找最优有效边界环境是当前研究中的关键问题[35]。根据幂方法的基本直觉，这等价于寻找转移矩阵的主特征向量。具体来说，如果我们定义一个无限的一维行转移矩阵 $T$：

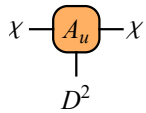



并在上边界无限矩阵乘积态上反复应用它，直至收敛，我们将得到以下不动点方程：



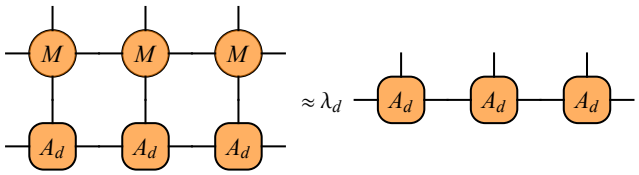

(5)

其中 $\lambda_u$ 是 $T$的最大特征值。上边界无限矩阵乘积态由单元张量 $A_u$ 构成，其虚拟键维数为 $\chi$：




(6)

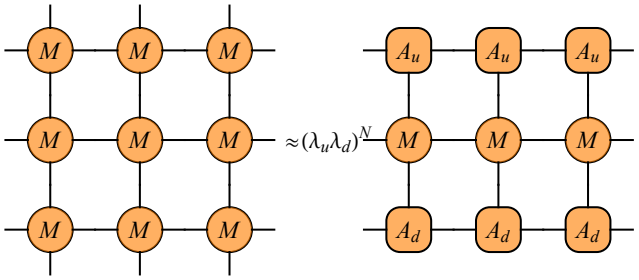
同样，可以求得下边界环境无限矩阵乘积态：




(7)

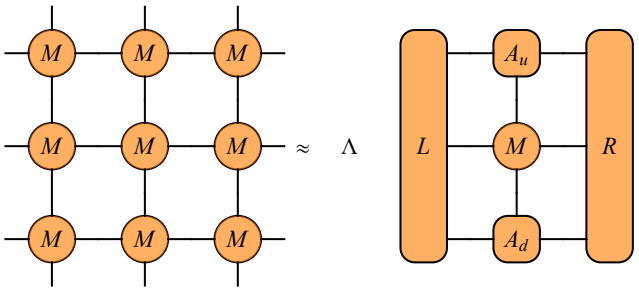
其中 $A_d$ 是单元张量，$\lambda_d$ 是对应的主导特征值。

因此，例如可以逐行收缩二维无限张量网络（式（2）），并将其转换为一维无限张量网络有三行：

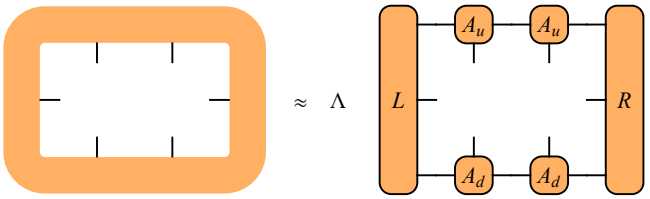



其中 $N$ 表示已处理的行数。

这个无限张量网络也可以按照前文讨论的相同方法轻松缩并：定义一个列转移矩阵，并求出其左右主特征向量。因此，整个二维无限张量网络可缩并为：




因此，式（4）中的有效边界环境可写为：




(8)

其中，$\Lambda$ 是一个无关紧要的系数，由主导特征值相乘得到，并会在式（4）的分子和分母中相互抵消。

### B. 张量网络缩并：VUMPS

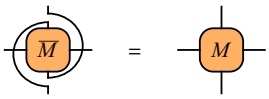
除了幂迭代之外，人们还开发了更复杂的技术来确定有效边界环境，正如文献 [31, 33,53]所示。在这些方法中，基于变分原理迭代不动点函数的 VUMPS 算法因其高效率和可扩展性而备受关注 [30–32]。本节将首先介绍适用于

转移矩阵为厄米共轭的情形下的 VUMPS 方法。随后讨论其向非厄米情形的扩展。最后，介绍其在更一般情形下的实现，即一个晶胞中包含多个格点。

### 1. *Hermitian VUMPS*

受 DMRG 方法启发，VUMPS 算 [30] 法最初是为求解一维系统的基态而开发的。随后，利用规范形式 和不动点函数，该方法被改进用于收缩具有厄米共轭转移矩阵的无限二维方格晶格张量网络 [54]。我们将首先介绍这一算法作为铺垫，熟悉该算法的读者可以直接阅读下一小节。

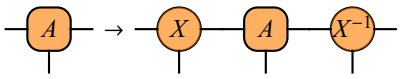
首先，让我们先讨论转移矩阵的厄米性。厄米转移矩阵的一个直接结果是，下环境是上环境的复共轭，这意味着 $A_d = A_u$。这意味着只需要一个侧环境，我们也将看到，这同样是将主特征值问题重新表述为变分优化问题的关键。这种厄米性与物理系统的对称性密切相关，尤其是使得以下关系成立的特殊反射：



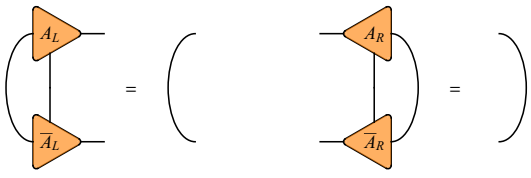

(9)

这定义了物理键上矩阵乘积算符的厄米共轭伴随。

另一个重要概念是无限矩阵乘积态的规范形式 。对于给定的张量 $A$，无限矩阵乘积态有唯一的定义，但反过来则不成立。这可以从以下局部规范变换看出：



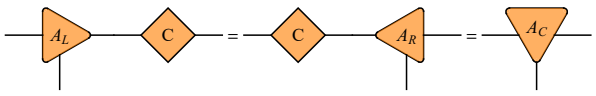

不会改变无限矩阵乘积态。因此，我们总能选择更合适的规范，而规范表示是最常用的。在这种表示中，左正交归一张量 $A_L$ 和右正交归一张量 $A_R$ 满足以下条件：




(10)

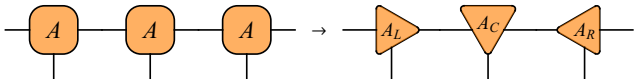
假设 $A_L$ 与 $A_R$ 之间的规范变换由张量 $C$ 实现，则中心位点张量 $A_C$ 可表示为

定义：




(11)

因此，无限矩阵乘积态的规范形式如下：




其中间有一个 $A_C$ 张量，其左右两侧分别有无限多个 $A_L$ 和 $A_R$ 张量。使用规范表示可以简化张量网络收缩，因此接下来我们将采用这种表示。更多信息请参阅文献 [54] ，了解如何获得规范形式；代码实现见 [48] 。

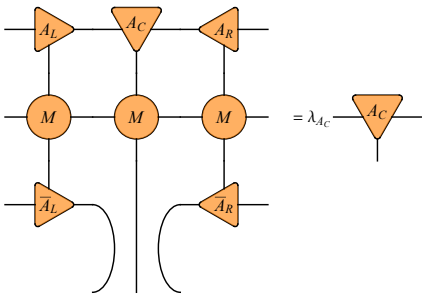
现在介绍 VUMPS 算法。再次强调，我们的目标是找到最大特征值的
以下特征值方程：

$$T|\psi(A)\rangle = \lambda_{\text{row}}|\psi(A)\rangle \tag{12}$$

或图示为公式（5）和公式（7），其中 $|\psi(A)\rangle$ 是由 $A$ 张量组成的边界无限矩阵乘积态。在转移矩阵 $(T)$ 为厄米共轭的情况下，变分原理适用，求解最大特征值等价于求解：

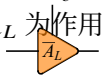
$$A = \arg\min_{A}\left(-\log\frac{\langle\psi(\bar{A})|T|\psi(A)\rangle}{\langle\psi(\bar{A})|\psi(A)\rangle}\right) \tag{13}$$

VUMPS 算法采用在式（13）的梯度为零时更新不动点函数的迭代方法，而非基于梯度的优化方法；该方法已被证明更加高效。使用规范表示时，不动点函数可简化为：



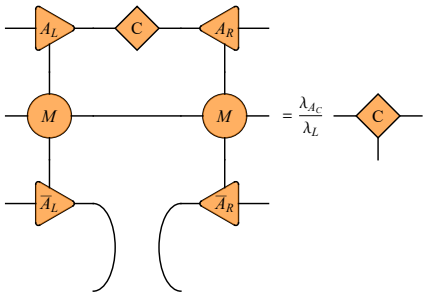

(14)

其中$\lambda_{A_c}$ 是相应的主导特征值。将其代入上述方程，并令 $\lambda_L$ 为作用于左环境时转移矩阵的最大特征值






我们可以得到另一个不动点函数：




(15)

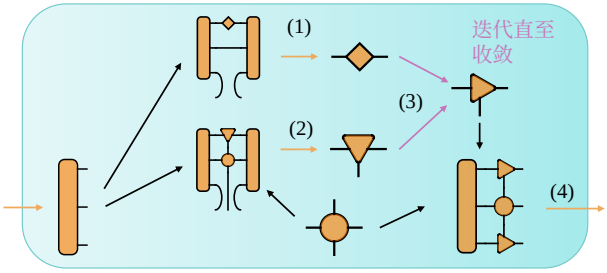



图 2：厄米 VUMPS 步骤：黑色箭头表示张量缩并，橙色箭头表示主特征值求解器，紫色箭头表示 QR 分解。(1)(2)(4)通过各自的张量缩并映射求得主特征向量 $A_C$, $C$ 和 $L$，$R$。(3)对 $A_C$ 和 $C$ 进行 QR 分解，得到 $A_L$，如式（16）所示

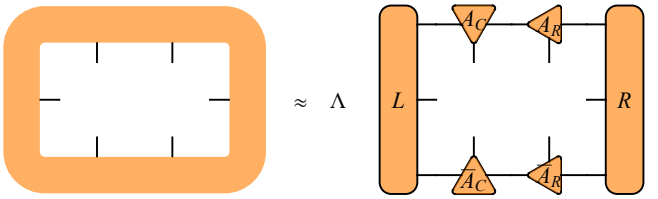
可以使用迭代式主特征值求解器（例如 Arnoldi）[55], 来求解这些特征值问题。

迭代过程如图 2所示。我们首先随机初始化一个无限矩阵乘积态局部张量，并在规范表示下求得其左/右环境 $L/R$，然后依次执行步骤 $L$、$R \to A_C$、$C \to A_L$、$A_R$，直至收敛。需要强调的是，步骤 $A_C$、$C \to A_L$、$A_R$中不应用式（11），因为当 $C$ 的维度较高时，它可能变为奇异，这会导致$A_L = A_C \cdot C^{-1}$的实际计算不稳定。取而代之的是，我们对 $A_C$ 和 $C$进行 QR 分解，并通过转置求得其逆：

$$\begin{aligned} A_L &= A_C \cdot C^{-1} \\ &= Q_{A_C} \cdot R_{A_C} \cdot R_C^{-1} \cdot Q_C^{-1} \\ &= Q_{A_C} \cdot R_{A_C} \cdot R_C^{-1} \cdot Q_C^{\dagger} \\ &\approx Q_{A_C} \cdot Q_C^{\dagger} \end{aligned} \tag{16}$$

当 VUMPS 收敛时，最后一步近似的误差很小。因此，我们可以将 $\|R_{A_C} - R_C\|$ 定义为 VUMPS 算法误差。此外，$A_L$ 会自动满足式（10）中的规范规范条件，因为$Q_{A_C}$ 和 $Q_C$ 均为厄米共轭矩阵。 $A_R$ 可以用相同的方法求解。

最后，式（4）中对应于厄米共轭传递矩阵的有效边界环境可写为：



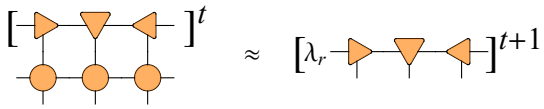

(17)

### 2. *Non-hermitian VUMPS*

在实际物理模型中，转移矩阵的厄米共轭条件并不总能满足，尤其是在一个晶胞中包含多个格点的情况下 [35, 56]。因此，必须扩展 VUMPS 算法以处理更一般的情况。尽管这里不再应用变分原理，但始终可以使用幂方法来寻找主特征向量 [54]。作为处理包含多位点元胞的更复杂情况的准备，本节将范围限定在单格点晶胞的情况，并假设 $T$ 是非厄米共轭的，以便读者能够更好地理解这一方法。

当转移矩阵不是厄米共轭矩阵时，我们无法像厄米共轭情形那样一次性获得所有环境张量。我们应遵循第IIA节中的步骤，首先沿水平方向计算环境张量，然后再沿垂直方向计算。

我们首先讨论单个幂迭代步。给定第 $t$ 步时键维数为 $\chi$ 的上边界无限矩阵乘积态，将转移矩阵 $T$ 作用于该态后，键维数会增加。我们的目标是找到另一个键维数为 $\chi$ 的无限矩阵乘积态来逼近它，并将新的无限矩阵乘积态作为第 $t+1$ 步的初始无限矩阵乘积态。该过程由以下方程表示：

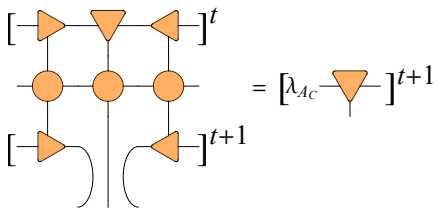



其中 $\lambda_r$ 是比率。为简化记号，在不会造成歧义的情况下，我们省略张量记号中的所有字母，因为不同张量的形状各不相同，如式（11）所示。括号外的上标表示幂迭代步。

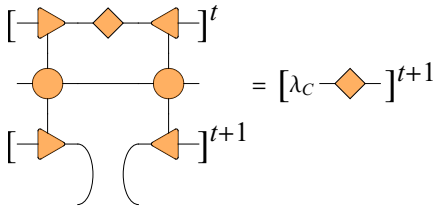
因此，应在一个幂迭代步内最大化两个边界无限矩阵乘积态 $|\psi(A^t)\rangle$ 和 $|\psi(A^{t+1})\rangle$ 之间的保真度。这将导出针对 $A^{t+1}$ [54] 的变分优化：

$$\arg\max_{A^{t+1}} \left( \log \frac{\langle \psi(\bar{A}^{t+1}) | T | \psi(A^t) \rangle \langle \psi(\bar{A}^t) | T^{\dagger} | \psi(A^{t+1}) \rangle}{\langle \psi(\bar{A}^{t+1}) | \psi(A^{t+1}) \rangle} \right) \tag{18}$$

其形式与方程（13）类似，但将 $T \to T|\psi(A^t)\rangle\langle\psi(\bar{A}^t)|T^\dagger$ 替换为即可。类似地，相应的不动点函数也可写为：



(19)



(20)

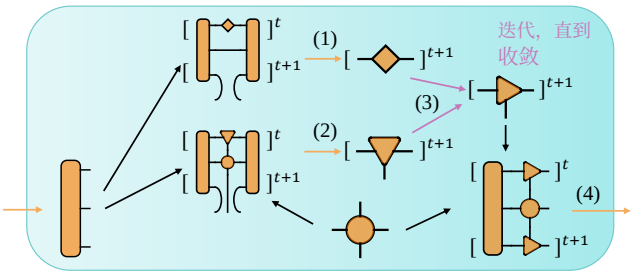
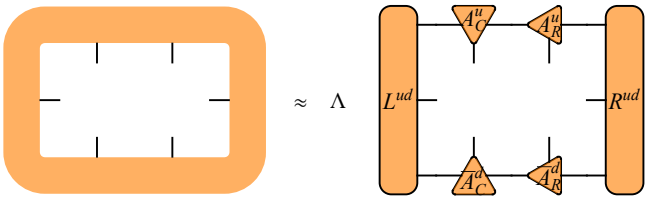



图 3：非厄米 VUMPS 步骤：不同颜色和步骤 (1)(2)(3)(4) 的含义与图 2 相同。不同之处在于，我们在幂方法的第 $t$次迭代中使用上标。

这不过是将 $A_L$ 和 $A_R$ 在式（14）和式（15）中的值替换为下一次幂迭代步中的对应值。按照图3所示的过程，即可得到最优上边界无限矩阵乘积态。

值得注意的是，在转移矩阵非厄米共轭的情况下，上环境和下环境可能表现出不同的特性。因此，需要重复上述计算以获得下方无限矩阵乘积态。这最终会使计算成本达到厄米共轭情况下的两倍。

在获得上环境张量和下环境张量后，很容易对无限三行张量进行收缩，并找到左环境张量和右环境张量。有效边界环境 在公式（4）可写为：

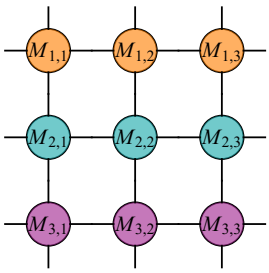


(21)

### 3. *Large Unit Cell version of VUMPS*

现在，我们可以介绍用于处理多位点元胞一般情况的算法了。为此，我们开发了一个易于使用的软件包 TeneT.jl [48]。

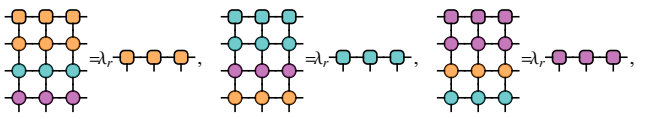
设正方晶格上无限二维张量网络的晶胞大小为 $N_i \times N_j$，其中 $N_i$ 和 $N_j$ 分别表示每列和每行的晶格点数。以 $N_i = N_j = 3$ 为例，晶胞可图示为：



(22)

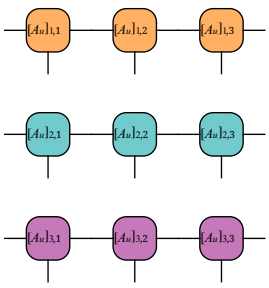
其中，晶格点用其行、列索引标记。为便于区分，每一行都用不同颜色表示。相应地，可以定义三个转移矩阵 $T_1$、$T_2$ 和 $T_3$。可以看出，即使转移矩阵 $T_1T_2T_3$ 是厄米共轭的，交替转移矩阵 $T_2T_3T_1$ 和 $T_3T_1T_2$ 也不是厄米共轭的。因此，我们需要求出上环境和下环境。

显然，共有六个不动点方程。其中三个用于上环境：



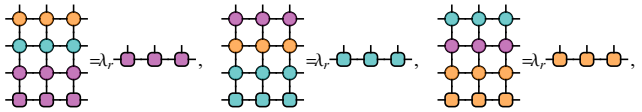
(23)

其中，边界无限矩阵乘积态定义为：



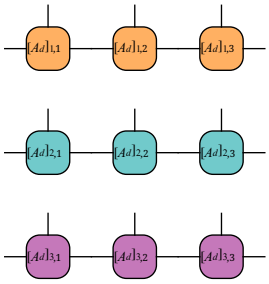
(24)

另外三个则对应下方环境：



(25)

其中，边界无限矩阵乘积态为：

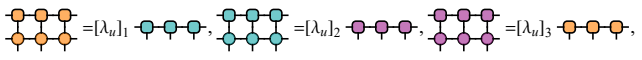


(26)

由于平移不变性，六个方程中的最大特征值 $\lambda_r$ 都相同，但不同转移矩阵对应的特征向量并不等价。

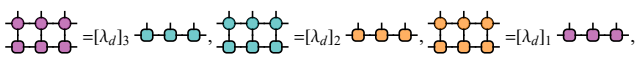
如果直接将上一节讨论的方法应用于这六个方程，计算复杂度将是单个晶胞情形的 $3\times3\times3$ 倍，其中，$3\times3$ 复杂度的增加源于晶胞内参数数量的增加，最后的 3 倍则是由于存在三对不同的环境。不过，我们可以通过一个技巧同时求解所有上方或下方环境，将计算复杂度降至单个晶胞情形的 $3\times3$。详情如下。

很容易将上述六个方程转换为六个规模更小的方程：



(27)

And:



(28)

其中 $\lambda_r = [\lambda_u]_1[\lambda_u]_2[\lambda_u]_3 = [\lambda_d]_1[\lambda_d]_2[\lambda_d]_3$，且所有 $\lambda$s 都可以不同。我们付出的代价是，这些方程不再是本征方程，因此也无法再使用主特征值求解器。幸运的是，如果将这组方程写成以下形式，就可以重构出一个特征值问题：

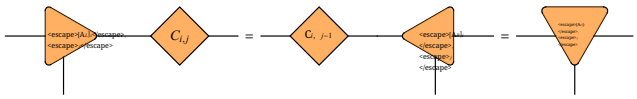
$$\begin{pmatrix} & & T_3 \\ T_1 & & \\ & T_2 & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} [A_u]_{1,:} \\ [A_u]_{2,:} \\ [A_u]_{3,:} \end{pmatrix} = \lambda_u \begin{pmatrix} [A_u]_{1,:} \\ [A_u]_{2,:} \\ [A_u]_{3,:} \end{pmatrix} \tag{29}$$

$$\begin{pmatrix} & \tilde{T}_2 & \\ & & \tilde{T}_3 \\ \tilde{T}_1 & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} [A_d]_{1,:} \\ [A_d]_{2,:} \\ [A_d]_{3,:} \end{pmatrix} = \lambda_d \begin{pmatrix} [A_d]_{1,:} \\ [A_d]_{2,:} \\ [A_d]_{3,:} \end{pmatrix} \tag{30}$$

其中，为了方便起见，我们固定 $\lambda_u = [\lambda_u]_1 = [\lambda_u]_2 = [\lambda_u]_3$ 和 $\lambda_d = [\lambda_d]_1 = [\lambda_d]_2 = [\lambda_d]_3$。冒号表示整行张量，而波浪号表示交换张量的上下指标。

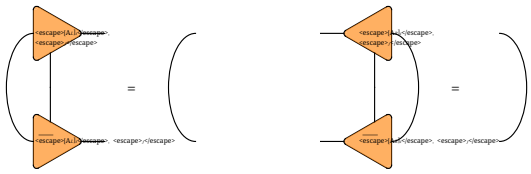
值得一提的是，尽管这里存在由转移矩阵组成的大矩阵，但并不存在内存问题，因为实际操作中不会显式构造该矩阵。我们将方程 (29) 和方程 (30) 视为线性映射，它们由上述三个不动点方程组合而成。可以使用 Arnoldi 等通用特征值求解器同时求解这两个线性映射 [55]。

在进行幂迭代过程之前，我们先明确写出大晶胞[34]中边界无限矩阵乘积态的规范形式：



(31)

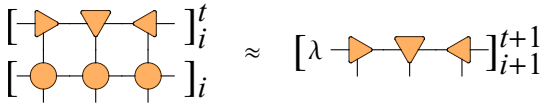
其中：



(32)

其中每个张量的指标都经过了仔细标注。

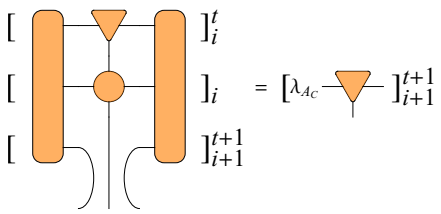
在这种情况下，应用一步幂迭代意味着求出：



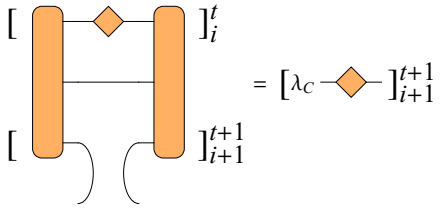
(33)

其中，上标再次标记幂方法中的第 $t$ 次迭代，下标表示该方程对应第 $i$ 个行转移矩阵；$i$ 和 $i+1$ 在 1 与 $N_i = 3$ 之间循环置换。对于

式（33），相应的不动点方程为：



(34)



(35)

大晶胞情况下的迭代过程见图4

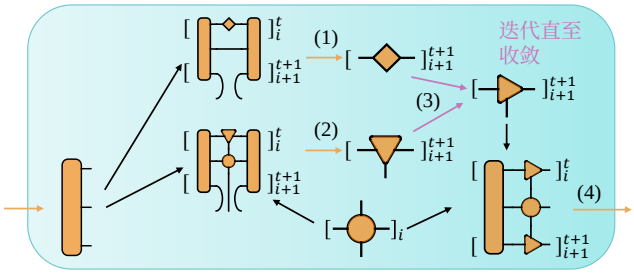



图 4：大晶胞 VUMPS 步骤：不同颜色以及步骤（1）（2）（3）（4）的含义与图 2相同。不同之处在于，我们在幂方法中用上标表示第 $t$次迭代，并用下标表示第 $i$ 行转移矩阵。

与先前工作 [34], 相比，我们通过迭代式（34）和式（35）中的不动点函数来改进算法，不仅迭代行索引 $i$，还迭代幂指数 $t$。这基于非厄米 VUMPS 方法 [54]。在实际应用中，与原始方法相比，我们改进后的迭代方法表现更优。

### C. 自动微分优化

通过在式（1）上使用基于梯度的优化直接优化基态能量来获得基态。我们按照 [41], 中的描述，使用自动微分计算其梯度，然后使用拟牛顿 L-BFGS 算法优化无限投影纠缠对态 [57]。与数值微分相比，自动微分可以将导数计算到机器精度，并且具有与能量评估相同的复杂度 [58]。

此外，与传统的基于梯度的张量方法（如 [46, 47], 中提出的方法）相比，自动微分消除了繁琐的图求和需求。

#### 1. *Basics of AD*

自动微分从根本上依赖于计算图框架，其中图中的节点表示数据点，箭头表示计算步骤中的数据流。例如，简单的线性链式计算图$\theta \to T_1 \to T_2 \to \mathrm{L}$ 展示了向量参数 $\theta$ 转换为标量输出 L 的过程。这个过程通常称为前向求值。

为了获得 L 相对于 $\theta$ 的梯度，使用链式法则：

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial T_2}\frac{\partial T_2}{\partial T_1}\frac{\partial T_1}{\partial \theta} \tag{36}$$

在输入维度高于输出维度的大多数情况下，例如深度神经网络的损失函数或物理学中的自由能，36式从左向右计算会更加高效。相应的$\bar{}$ $\bar{}$ $\bar{}$ $\bar{}$计算图为 $\theta \leftarrow T_1 \leftarrow T_2 \leftarrow \mathcal{L}$。这一过程需要将伴随变量定义为$\bar{T} = \partial\mathcal{L}/\partial T$，表示最终输出$\mathcal{L}$ 相对于变量 $T$的梯度。计算$\bar{}$ $\bar{}$从$\bar{\mathcal{L}} = 1$ 开始，向 $\theta$推进，即计算梯度，并通过多个由左箭头表示的向量-雅可比积运算来完成。这种技术称为反向模式自动微分或反向求值。

值得注意的是，迭代张量网络计算的计算图可能相当复杂，难以分析。幸运的是，现代机器学习框架，例如 PyTorch[59], JAX[60], 和 Zygote [61]，支持对任意复杂的计算图进行自动微分。原则上，一旦建立了前向计算，就应当可以轻松获得反向计算。然而，经过优化、效率很高的前向程序在实践中可能无法进行微分，原因可能是原位内存使用或基础库的限制。为解决这一难题，可以将加法、乘法和数学函数等多个基本运算组合成一个整体，从而构建可微基本算子，然后定义该基本算子的伴随算子。一旦初始程序中的所有基本算子都变得可微，整个程序也就变得可微；通过精心设计，还能确保其效率与前向计算完全相同。

### 2. VUMPS primitives

用于计算无限投影纠缠对态缩并能量的计算图如图 5所示，它依赖于 VUMPS 的子图，如图 2所示。在 VUMPS 过程中，QR 分解和主特征值求解器本身不可微。因此，我们将它们视为基本算子，并讨论如何求得其伴随算子。

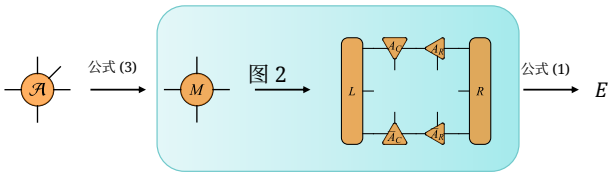



图 5：从无限投影纠缠对态到能量的完整计算图，其中公式（3）正在构建 $M$ 张量，图2 是获取环境张量的 VUMPS 步骤，公式（1）是用于能量的三维收缩

QR 分解的伴随 [62] 是

$$\bar{M} = [\bar{Q} + Q\,\mathrm{Hermitian}(R\bar{R}^{\dagger} - \bar{Q}^{\dagger}Q)](R^{\dagger})^{-1} \tag{37}$$

其中，厄米共轭表示用下三角矩阵元素的共轭替换上三角矩阵元素。

主特征值求解器的伴随见文献 [63]。关键在于求解一组受限线性方程组。主导本征方程定义如下：

$$\boldsymbol{l}^T\mathcal{M} = \lambda\boldsymbol{l}^T, \quad \mathcal{M}\boldsymbol{r} = \lambda\boldsymbol{r}, \quad \boldsymbol{l}^T\boldsymbol{r} = 1 \tag{38}$$

反向传播的伴随为：

$$\bar{\mathcal{M}} = \bar{\lambda}\boldsymbol{l}\boldsymbol{r}^T - \boldsymbol{l}\bar{\xi}_l^T - \xi_r\boldsymbol{r}^T \tag{39}$$

其中，$\xi_l$ 和 $\xi_r$ 通过以下方式求解：

$$\begin{aligned}(\mathcal{M} - \lambda I)\xi_l &= \left(1 - \boldsymbol{r}\boldsymbol{l}^T\right)\bar{l}, \quad \boldsymbol{l}^T\xi_l = 0\\ \left(\mathcal{M}^T - \lambda I\right)\xi_r &= \left(1 - \boldsymbol{l}\boldsymbol{r}^T\right)\bar{\boldsymbol{r}}, \quad \boldsymbol{r}^T\xi_r = 0\end{aligned} \tag{40}$$

上述方程应在与 $\boldsymbol{l}$ 或 $\boldsymbol{r}$ 正交的空间中求解。但考虑到 $\mathrm{M} - \lambda I$ 不满秩，我们只需使用迭代算法（例如 GMRES [64], ），并以该正交空间中的向量作为初始猜测来求解方程。

在 VUMPS 的反向传播中，我们只需要一侧的主特征向量，$\boldsymbol{l}$ 或 $\boldsymbol{r}$，因为我们分别求解环境。因此，方程（39）可以简化。首先，假设只使用 $\boldsymbol{l}$ ，$\lambda = 0$，$\bar{\boldsymbol{r}} = 0$，且计算结果是规范不变的，因此 [63]

$$\boldsymbol{l}^T\bar{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{r}^T\bar{\boldsymbol{r}} = 0 \tag{41}$$

公式（40）可简化为：

$$\begin{aligned}(\mathcal{M} - \lambda I)\xi_l &= \bar{l}, \quad \boldsymbol{l}^T\xi_l = 0\\ \left(\mathcal{M}^T - \lambda I\right)\xi_r &= 0, \quad \boldsymbol{r}^T\xi_r = 0\end{aligned} \tag{42}$$

假设 $\xi_r \neq 0$, $\xi_r$ 必须是 M 的左特征向量，这与 $\boldsymbol{r}^T\xi_r = 0$ 冲突，因此 $\xi_r = 0$。最后，我们只通过$\boldsymbol{l}$的前向计算得到左主特征值求解器的伴随：

$$\bar{\mathcal{M}} = -\boldsymbol{l}\bar{\xi}_l^T \tag{43}$$

同样，只需对 $\boldsymbol{r}$ 进行前向计算，即可得到右侧主特征值求解器的伴随：

$$\bar{\mathcal{M}} = -\bar{\xi}_r\boldsymbol{r}^T \tag{44}$$

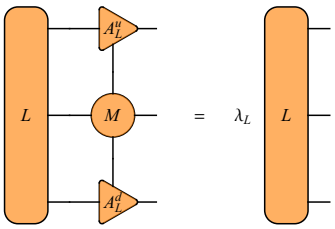
### 3. Technical comments

为了最大限度地降低计算开销，建议避免在主特征值求解器的反向传播过程中构造伴随 M 张量，正如我们在正向传播过程中应避免构造 M 一样。相反，我们可以直接构造这两个步骤的伴随，即 M 与主特征值求解器的缩并。

具体而言，在获取 VUMPS 环境时，我们不会直接构造 M。作为说明，为了获得$L$，由 表示的六阶张量 M 需要接受



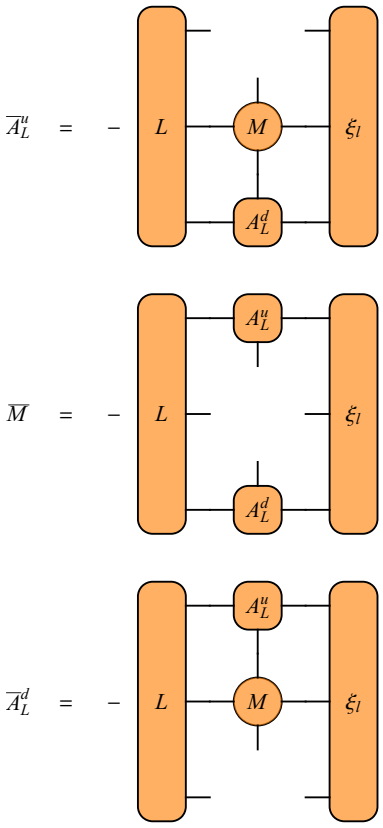
通过 $A_L^u$、$M$ 和 $A_R^d$ 进行缩并，会导致大量内存消耗。我们可以改为定义这个本征方程的线性映射，即依次缩并 $L$、$A_L^u$、$M$、$A_L^d$，然后使用 Krylov 子空间方法 [55, 65, 66] 等迭代方法求解主导本征方程。采用最优缩并顺序执行此线性映射，将得到一个四阶张量，并减少内存使用量。




(45)

同样，我们在$\mathcal{M}$ 反向传播中无法直接获得。根据计算图 $\bar{M}$、$\bar{A}_L^u$、$\bar{A}_L^d$，我们得到 $M$、$A_L^u$、$A_L^d \longrightarrow \mathcal{M} \longrightarrow L$。具体而言，使用式（42）的第一个方程，通过 Krylov 方法求解 $\xi_l$，然后

使用下面的收缩图得到 $\bar{A}_L^u$、 $\bar{M}$、 $\bar{A}_L^d$:




(46)

最后，为了确保反向传播的稳定性和效率，我们采用了一些关键技巧:

•QR 分解的伴随计算涉及矩阵求逆，而 VUMPS 的混合规范求逆是奇异的，这意味着 $\det(C) \approx 0$。我们通过在 $C$ 的对角线上加上一个小数值（$10^{-12}$）来求解线性方程组，而不是计算逆矩阵。这一技巧以在梯度中引入微小误差为代价，使计算更加稳定；从实验结果来看，这对最终结果的影响极小。

•由于上述奇异性，线性方程组 Eq. (42) 不稳定，因为 $\boldsymbol{l}$ 与不正交 $\boldsymbol{l}$。因此，我们应从 $\boldsymbol{l}$中减去与 $\boldsymbol{l}$不正交的部分。

• 我们在优化过程中持续保存和加载 VUMPS 环境，原因有二。其一，受退火启发，相邻两步中的无限投影纠缠对态仅有细微差异，环境张量也同样如此。因此，将上一步的环境张量加载为初始值，可以使算法更快收敛。其二，减少前向步骤可以避免梯度爆炸，并降低反向过程中的内存使用量。

• 为了解决由最后一次能量收缩导致的最大内存使用量问题，我们采用检查点技术。

## III. 应用

作为所开发方法的首个应用，我们考察 $K$-$J$-Γ-Γ′ [4, 67, 68] 哈密顿量，

$$\begin{aligned}\hat{H} = \sum_{\langle i,j\rangle_\gamma} & K S_i^\gamma S_j^\gamma + J\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \Gamma\left(S_i^\alpha S_j^\beta + S_i^\beta S_j^\alpha\right) \\ & + \Gamma'\left(S_i^\alpha S_j^\gamma + S_i^\gamma S_j^\alpha + S_i^\beta S_j^\gamma + S_i^\gamma S_j^\beta\right)\end{aligned} \tag{47}$$

其中，$\mathbf{S}_i = \{S_i^x, S_i^y, S_i^z\}$ 是格点 $i$上的赝自旋-1/2 算符，$i$, $j\gamma$ 表示 $\gamma$键上的最近邻对，其中 $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ 在循环置换下对应于 $\{x, y, z\}$。 $K$ 是 Kitaev 耦合， $J$ 是海森堡项， Γ 和 Γ′ 是非对角耦合。

哈密顿量方程（47）包含纯 Kitaev 相互作用之外的附加项，可用于描述铱氧化物和 $\alpha$-$RuCl_3$ 等真实材料。例如，由超交换相互作用引起的海森堡项 $J$ 是$5d-5d$超交换相互作用所致。此外， Γ和 Γ′ 项是超交换相互作用；由于材料中的自旋轨道耦合和晶格畸变，它们具有较低的对称性。

$K$-$J$-Γ-Γ′ 哈密顿量呈现出丰富的相图，包括铁磁（FM）、反铁磁（N´eel）、锯齿序（ZZ）和条纹相 [24], ，以及具有 6 位点、18位点晶胞 [22,40] 的更复杂相。上述方法特别适合研究这类问题。

首先，我们将蜂窝晶格元胞中的两个格点组合起来，因此仍然是在正方晶格上定义、物理键维数为$d = 2^2$的无限投影纠缠对态，如图6(a)所示。类似地，在考虑复杂的自旋有序相时，也可以将若干元胞组合起来，以表示一个较大的磁性晶胞；例如，图6(a)中的黑框表示一个由四个晶格点组成的磁性晶胞。 [69]

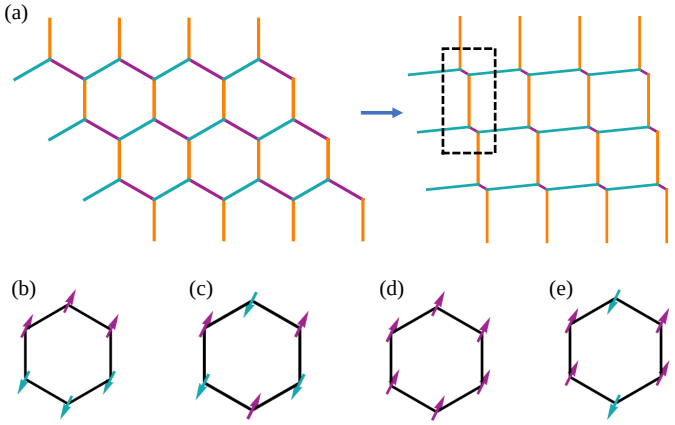



图 6：(a) 将原始蜂窝晶格晶胞中的两个格点合并，从而将蜂窝晶格变换为正方晶格。 $x$-、 $y$-和 $z$-键分别以紫色、青色和橙色线条表示。黑色虚线框表示 $2 \times 1$ 晶胞，并展示了四种相：(b) 锯齿形、(c) N´eel、(d) 铁磁相和 (e) 条纹相。

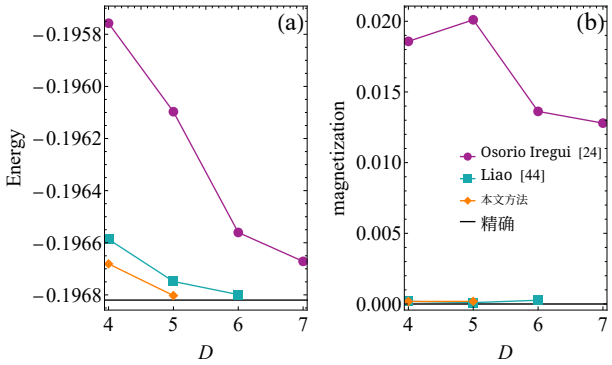



图 7：纯 Kitaev 模型（$K = -1$）的基态能量和磁化强度随 $D$ 的变化。我们获得了比虚时间演化更精确的结果，且结果与 CTMRG 相当。

### A. 纯 Kitaev 模型

我们首先对纯 Kitaev 模型进行基准计算，该模型仅包含 $K = -1$，不含其他项。其基态可以精确求解 [1], ，并已证明是一种没有磁序的无能隙量子自旋液体。另一方面，由于自旋阻挫程度很高，Kitaev 自旋模型的数值模拟仍然颇具挑战性。

图 7(a) 表明，使用 $D = 5$ $(\chi = 120)$ 可以获得变分能量 $E = -0$。196805，与精确结果–0。19682 在小数点后四位精度上一致。变分能量显著低于此前基于虚时间投影的优化（全更新），直至 $D = 7$ $(\chi = 60)$ [24] ，并且与精心构造的无限投影纠缠对态 $-0$。19681（采用 $D = 8$ [70]）的结果相当。更重要的是，如图 7(b) 所示，变分优化得到的磁化强度基本为零（小至 $10^{-4}$）。图中还展示了通过对 CTMRG 缩并进行微分得到的未发表结果，该结果与近期的结果 [71]类似。这些基准结果表明，即使键维数适中，经过更充分的优化，仍可在纯 Kitaev 模型上获得高精度结果。

VUMPS 方法的主要计算复杂度与 CTMRG 相当。计算复杂度可表示为 $O(D^6\chi^3)$。我们使用 NVIDIA A100-40G GPU 进行了数值模拟。对于纯 Kitaev 模型，在 $D/\chi = 4/80$ 时耗时约 4 小时，在 $D/\chi = 5/120$ 时耗时 17 小时。

值得注意的是，AD 方法使用比虚时间演化更小的 $D$，但使用更大的 $\chi$，从而获得更低的能量。这恰好证明了 AD 的优化能力优于虚时间演化，而解决 Kitaev 模型的关键在于优化能力，而非表征能力。这意味着，小型 $D$ 的表征能力（即纠缠量）足以承载 Kitaev 基态的复杂性，而需要较大的边界环境键维数 $\chi$。我们需要更大的 $\chi$，是因为在相同的 $D$ 下，我们的基态无限投影纠缠对态比虚时间演化更复杂（因此推测纠缠更强），所以需要具有更大 $\chi$的环境，也就是更多的纠缠，才能进行精确缩并。为证明这一点，我们在附录 A中考察了能量和关联长度随键维数 $\chi$ 的收敛情况。根据以上结果，我们发现，AD 的优化能力使无限投影纠缠对态达到虚时间演化无法企及的状态。同时，缩并能力也至关重要；正如第 II C3节所述，我们也通过一种类似退火的方式，借助 AD 克服了这一难题。

### B. Kitaev-Γ模型

我们研究了具有铁磁Kitaev相互作用的 $K$-Γ 模型，该模型旨在捕捉真实材料 $RuCl_3$ [8, 9] 中自旋耦合的本质。研究发现，除了 $K$-Γ 模型中的 Kitaev自旋液体相（KSL）外，还存在向列顺磁相（NP）和具有 18位点晶胞的磁有序相 [22,40] 。

首先，我们发现 KSL 相在 Γ =0。03 时依然存在。与第 IIIA 节中对纯 Kitaev 模型的比较类似，与先前采用虚时间投影优化的无限投影纠缠对态研究相比，我们得到的磁化强度精确为零，且能量更低 [22]。

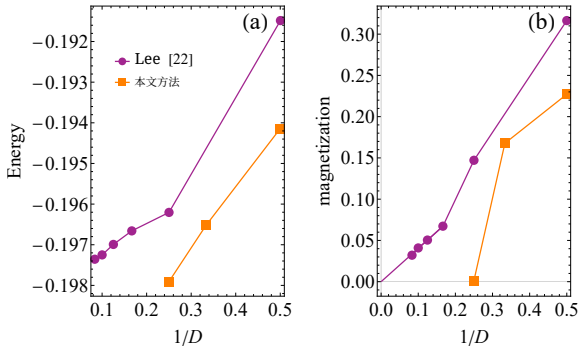



图 8：模型 $K$-Γ 在 $\Gamma = 0$ 处的基态能量和磁化强度。03。与 [22] 相比，我们直接获得了更低的能量和零磁化强度。

在 $\Gamma = 0$。095 时，先前研究尚未明确该模型呈现的是向列顺磁序还是铁磁序 [22]。我们的计算表明，基态为具有各向异性键能的向列顺磁态，且结果不受初始化方式影响。图 9(a) 显示，我们得到的变分能量显著更低。图 9(b) 展示了对键维数进行外推的结果，表明所得态的磁化强度为零，但键能各向异性有限。这里我们将 $\Delta E = \mathrm{std}(E_x,\ E_y,\ E_z)$ 定义为键能的标准差。

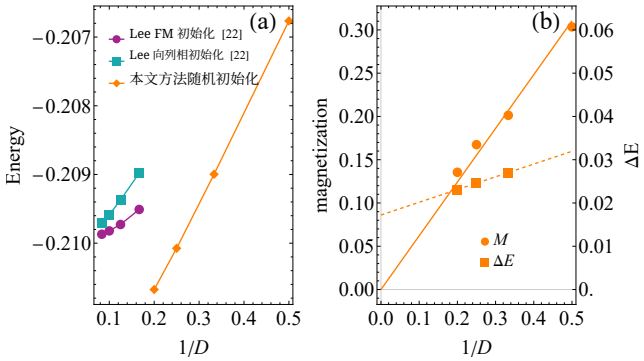



图 9：$K$-Γ 模型在 $\Gamma = 0.095$ 时的结果，其中 (a) 中观测到的能量低于先前结果，而 (b) 中磁化强度为零但 $\Delta E$ 非零。

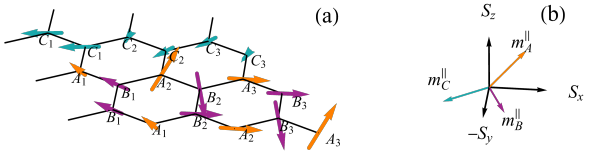



图 10：$K$-Γ 在 $\Gamma/|K| = 1$处的构型。0：不同颜色表示第 $ABC$ 节中的分量，这些分量在 IIIB 中构成之字形序，如图 $2\times2$ 所示的晶胞中 6(b) 所示，它们彼此反平行。然而，在这里的面板 (a) 中，并非所有分量都反平行，其中一些分量的夹角偏离了完全共线的状态。

在 $\Gamma = 1$处，我们获得了一种具有18位点晶胞的复杂自旋螺旋序，如图 10(a)所示。这些结果证实了先前的研究发现 [22, 40] ，但具有更低的每格点变分能量：在 $D = 4$ 处为 -0.3520，而 $D = 8$ 中报告的 [40]处为 -0.3518。此外，我们仅通过一次随机初始化计算便获得了该构型，而无需重复数百次初始猜测。为了尽量降低局部极小值的影响，我们还采用不同的晶胞尺寸和随机初始化进行了实验，以验证结果的可靠性。当晶胞设置为 $2\times2$时，我们将获得一种锯齿形序，其变分能量高于图 $6\times3$ 1010(a)所示的构型。另一方面，当将晶胞扩大至36个位点时，我们仍然获得了具有 $10^{-5}$ 更低每格点能量的18位点序。

图10(b)展示了三个亚晶格$\mathbf{m}_\mu = \frac{1}{N_{\mathrm{cell}}}\sum_{\text{胞}}\mathbf{S}_\mu$ 的亚晶格磁化强度，其中$\mathbf{m}_\mu$ 刻画了一组高度有序自旋螺旋的纵向分量（或旋转轴）。

### C. $K$-$J$-Γ-Γ′模型

最后，我们考虑哈密顿量方程（47）的最一般形式。我们采用模型参数 $K$ =–25meV， $\Gamma = 0$。$3|K|$，$\Gamma' = -0$。$02|K|$和 $J = -0$。$1|K|$ [14]，这些参数已被发现能够很好地拟合化合物 $\alpha$-$RuCl_3$ [3, 4, 9–13]。

特别是，对于这样的参数，密度矩阵重整化群计算表明基态呈现锯齿形磁序，而外加磁场可以抑制这种磁序。

在面内磁场作用下，锯齿序会转变为顺磁相；而在面外磁场作用下，系统首先会从锯齿序转变为非磁相，最终成为极化态。为模拟这些有趣的相及相变，我们在哈密顿量中加入$h\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{S}$这一项，以引入磁场。垂直于平面的方向表示为$\hat{\boldsymbol{n}} = (1,1,1)/\sqrt{3}$

平面内的方向表示为$\hat{\boldsymbol{n}} = (1,1,-2)/\sqrt{6}$。 $\boldsymbol{S} = (S_x, S_y, S_z)$是自旋 -1/2 算符，$h$ 表示磁场强度。文献 [14] 采用密度矩阵重整化群和热张量网络计算研究了有限圆柱上的相图，发现结果与实验观测一致。

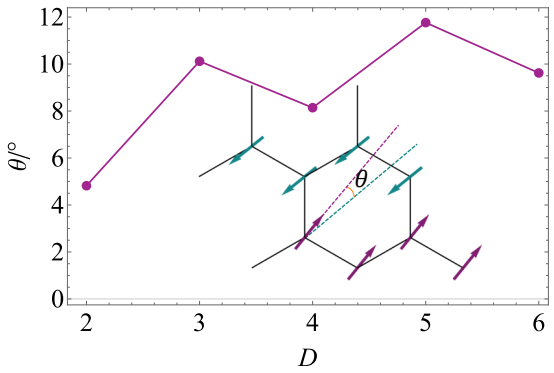



图 11： $K$-$J$-$\Gamma$-$\Gamma'$基态的非共线角 $\theta$ 随 iPEPS 模拟的键维数 $D$ 变化。插图定义了倾斜角 $\theta$。

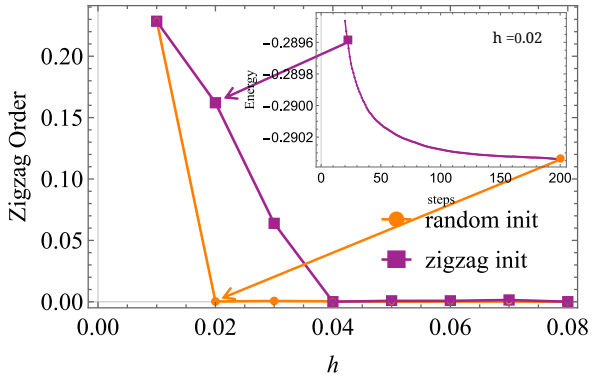



图 12：我们研究了不同初始化方式对面内磁化过程的影响。我们比较了两种情况：随机初始化和锯齿形初始化，发现两种情况最终都会收敛到相同状态，但所需的优化步数不同。以 $h = 0.02$ 为例，从锯齿形态开始时，系统在第 23 个优化步发生从锯齿序到顺磁态的转变，如能量子图中的紫色箭头所示。该状态的能量与随机初始化经过 200 个优化步后达到的状态相同，如能量子图中的橙色箭头所示。

首先，我们计算零场下的磁序 $h = 0$。如图 11所示，我们确实发现自旋形成了锯齿序。此外，我们还观察到磁矩并非完全反平行，而且这一结论对模拟中所有不同的键维数都成立

在模拟中，倾斜角随 $D$增大，如图11所示。我们推测，这种非共线自旋构型或可解释$\alpha$-$RuCl_3$ [72]中的磁介电效应。

在图12中，我们展示了面内磁场下的结果：当磁场超过某一临界值时，锯齿序参量消失，表明发生了锯齿序-顺磁相变。这与先前的模型研究 [14] 以及实验观测 [73–75]一致。不过，此处得到的临界磁场值与先前研究存在一些差异。以键维数为 $D = 5$ 的随机初始化 iPEPS 作为初态时，发现临界磁场为 $h_c/K \simeq 0.02$，对应 3.5 T （见图 12 橙色曲线），约为实验观测 [73–75] 以及先前针对同一模型的 DMRG计算 [14]中观测到的 7–8 T 相变磁场的一半。相反，以 ZZ 态作为初态时，我们发现临界磁场移至 $h_c/K \simeq 0.04$（约 7 T），而在我们的 iPEPS 计算中，得到的状态能量更高（图 12中的紫色曲线）。

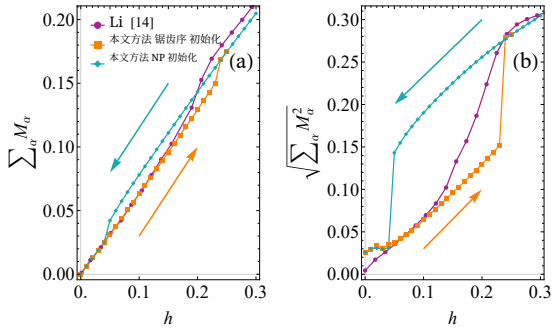



图 13：（a）均匀磁化强度和（b）采用$D = 5$ 无限投影纠缠对态计算得到的锯齿形相与向列初始相的局域磁化强度。一级相变可以通过均匀磁化强度和局域磁化强度的跃变来观察。然而，两种不同的方案，即 ZZ 和 NB 初始化，会产生不同的相变磁场。注意，局域磁矩 $\sqrt{\sum_\alpha M_\alpha^2}$ 在零场下仍为有限值，表明此处存在锯齿序。

面外磁场会引发从锯齿序到向列相的一阶相变。我们从锯齿序相开始增大磁场，达到临界磁场 0。23$|K|$ (43 T)，这与 DMRG 结果一致 [14]。序参量在临界点处发生突跃 [见图 13(a)]。然而，在同一幅图中，我们还发现，从向列相开始减小磁场时，会出现一个截然不同的相变磁场。它们甚至在图 13(b) 中形成了类似磁滞回线的形状。

为准确确定相边界，我们采用一种广泛使用的一级相变判定方法：分别以 ZZ 序或 NP 态作为初态，并寻找能量曲线的交点。交点收 $D = 5$ 敛于（能量差 $< 10^{-4}$ 图 14），对应的相变磁场强度为 0。11$|K|$。这对应于 $RuCl_3$, 中的 21 T，低于密度矩阵重整化群

计算（约 35 T）。这表明，准确确定一级相变的相变磁场可能并不容易，而且会受到在有限宽度圆柱几何上进行密度矩阵重整化群计算时有限尺寸效应的影响。

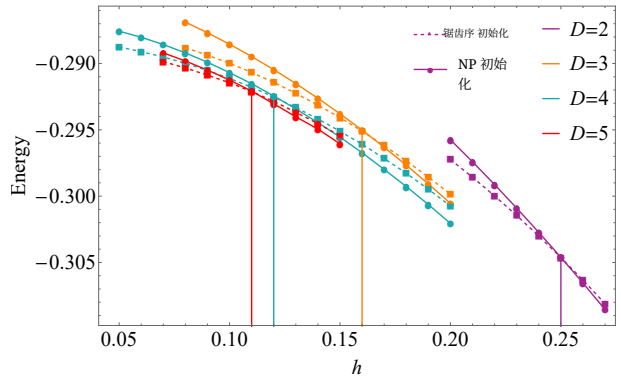



图 14：从锯齿序或非磁相开始初始化，我们通过能量交叉点确定跃迁点。不同初始态（锯齿序和非磁相）所得结果之间的能量交叉会影响能量值，进而影响交叉点。对于 $D = 5$，交叉点趋于收敛，并且发现为 $h = 0.11|K|$。

总体而言， $K$-$J$-$\Gamma$-$\Gamma'$ 模型捕捉到了在 $\alpha$-$RuCl_3$中观测到的磁序和相变的基本特征。该模型为理解这一化合物的行为及其对外加磁场的响应提供了有价值的见解，尽管由于多种因素的影响，包括实验拟合的复杂性以及数值计算中的有限尺寸/$\chi$ 效应，数值模拟与实验之间的临界磁场值可能仍难以完全匹配。要完全证实这些发现，还需要在确定哈密顿量参数和实验相边界方面取得进一步进展。

## IV. 讨论

我们已经证明，可微编程张量网络能够在 Kitaev 型受挫磁自旋系统中获得高度精确的结果。与以往采用简单更新或全更新方法进行的无限投影纠缠对态计算相比，该方法的结果更加可靠。例如，即使键维数较小，也能得到更精确的基态。此外，研究结果对优化中使用的初始态也不那么敏感（接近一阶量子相变的情况除外）。可微编程张量网络易于实现，且表现出色。该框架具有通用性，可应用于任何具有短程相互作用的二维量子系统。

我们还使用实现了 U(1)对称性（在自旋或电荷通道中）的费米子张量网络进行了一些计算，并且获得了与全更新计算一致的结果。然而，U(1) 块结构使我们难以在费米子 iPEPS 中使用 AD 方法。一个限制出现在对 iPEPS 张量进行分块时，因为不同的块划分可能导致不同的基态能量，因此必须手动选择块划分。另一个限制与 VUMPS 类似：无法为环境选择块划分。这是因为 VUMPS 不使用奇异值分解，而奇异值分解是 CTMRG 或 TEBD 等其他方法中选择块划分的关键步骤。我们计划在未来的工作中解决这些问题。

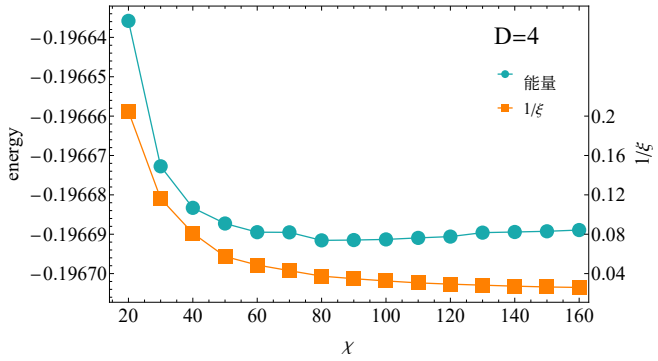
## V. 致谢

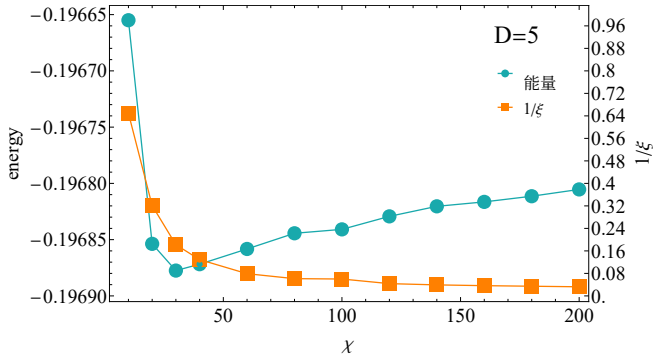
我们感谢谢昊、杨琪、李涵、龚守书、余顺尧、张浩恺、罗强、刘科和 Philippe Corboz 的讨论。我们感谢 Juan Osorio Iregui 提供图 7 中展示的参考数据。本项目得到国家重点研发计划项目（编号：2021YFA1400400 和 2022YFA1403900）、中国科学院战略性先导科技专项（编号：XDB30000000）、国家自然科学基金（编号：T2225018、T2121001、12222412、11834014、11974036）、中国科学院基础研究青年科学家项目（编号：YSBR-057）、中国博士后科学基金（编号：2021TQ0355）、中国科学院特别研究助理项目以及中国科学院青年创新促进会（编号：2021004）的资助。

## 附录 A：收敛与边界键维数的关系

下图展示了纯 Kitaev 模型模拟中，能量和关联长度（$\xi$）随边界环境的键维数 $\chi$ 变化的情况。图中清楚地显示，收敛行为出现在约 $\chi = 120$。尽管能量波动了 $10^{-5}$，但我们观察到，将键维数从$\chi = 60$ 增加到 $\chi = 120$时，关联长度翻了一倍。

我们优化模拟中最大值为 $D/\chi = 4/80,5/120,6/150$，并取更大的 $\chi$ 以确保可观测量收敛。




[1] A. Kitaev, Annals of Physics 321, 2 (2006年), january Spe- cial Issue.[2] G. Jackeli and G. Khaliullin, 《物理评论快报》 102, 017205 2009( ). [3] S. M. Winter, Y. Li, H. O. Jeschke, and R. Valent´ı, Phys. Rev. B 93, 214431 (2016年). [4] S. M. Winter, A. A. Tsirlin, M. Daghofer, J. van den Brink, Y. Singh, P. Gegenwart, and R. Valent´ı, Journal of Physics: Condensed Matter 29, 493002 (2017年). [5] M. Hermanns, I. Kimchi, and J. Knolle, Annual Review of Condensed Matter Physics 9, 17 (2018年), https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-033117-053934.[6] H. Takagi, T. Takayama, G. Jackeli, G. Khaliullin, and S. E. Nagler, Nature Reviews Physics 1, 264 (2019年). [7] A. Glamazda, P. Lemmens, S.-H. Do, Y. S. Kwon, and K.-Y. Choi, Phys. Rev. B 95, 174429 (2017年). [8] W. Wang, Z.-Y. Dong, S.-L. Yu, and J.-X. Li, Phys. Rev. B 96, 115103 (2017年). [9] K. Ran, J. Wang, W. Wang, Z.-Y. Dong, X. Ren, S. Bao, S. Li, Z. Ma, Y. Gan, Y. Zhang, J. T. Park, G. Deng, S. Danilkin, S.-L. Yu, J.-X. Li, and J. Wen, 《物理评论快报》 118, 107203 (2017年). [10] T. Suzuki and S.-i. Suga, Phys. Rev. B 99, 249902 (2019 年 ). [11] L. Wu, A. Little, E. E. Aldape, D. Rees, E. Thewalt, P. Lampen-Kelley, A. Banerjee, C. A. Bridges, J.-Q. Yan, D. Boone, S. Patankar, D. Goldhaber-Gordon, D. Man- drus, S. E. Nagler, E. Altman, and J. Orenstein, Phys. Rev. B 98, 094425 (2018年).

[12] T. Cookmeyer 和 J. E. Moore, 《Phys. Rev. B》98, 060412（2018年）。[13] L. J. Sandilands、Y. Tian、A. A. Reijnders、H.-S. Kim、K. W. Plumb、Y.-J. Kim、H.-Y. Kee 和 K. S. Burch, 《Phys. Rev. B》93, 075144（2016年）。[14] H. Li、H.-K. Zhang、J. Wang、H.-Q. Wu、Y. Gao、D.-W. Qu、Z.-X. Liu、S.-S. Gong 和 W. Li, 《自然通讯》12, 1（2021年）。[15] H.-C. Jiang、Z.-C. Gu、X.-L. Qi 和 S. Trebst, 《Phys. Rev. B》83, 245104（2011年）。[16] D. Vodola、L. Lepori、E. Ercolessi 和 G. Pupillo, 《新物理学杂志》18, 015001（2015年）。[17] N. M. Gergs、L. Fritz 和 D. Schuricht, 《Phys. Rev. B》93, 075129（2016年）。[18] M. Gohlke、R. Verresen、R. Moessner 和 F. Pollmann, 《物理评论快报》119, 157203（2017年）。[19] M. Gohlke、R. Moessner 和 F. Pollmann, 《Phys. Rev. B》98, 014418（2018年）。[20] Z. Zhu、I. Kimchi、D. N. Sheng 和 L. Fu, 《Phys. Rev. B》97, 241110（2018年）。[21] M. Gohlke、G. Wachtel、Y. Yamaji、F. Pollmann 和 Y. B. Kim, 《Phys. Rev. B》97, 075126（2018年）。[22] H.-Y. Lee、R. Kaneko、L. E. Chern、T. Okubo、Y. Yamaji、N. Kawashima 和 Y. B. Kim, 《自然通讯》11, 1639（2020年）。[23] F. Verstraete 和 J. I. Cirac, 《二维及更高维量子多体系统的重整化算法》（ 2004 0407066 ）, [ ] arXiv：凝聚态物理-强关联电子/凝聚态物理-强关联电子。

[24] J. Osorio Iregui、P. Corboz 和 M. Troyer，《Phys. Rev. B》90，195102（2014年）。[25] D. Gotfryd、J. Rusnaˇcko、K. Wohlfeld、G. Jackeli、J. c. v. Chaloupka 和 A. M. Ole´s，《Phys. Rev. B》95，024426（2017年）。[26] J.-Y. Chen、L. Vanderstraeten、S. Capponi 和 D. Poil- blanc，《Phys. Rev. B》98，184409（2018年）。[27] P. Czarnik、A. Francuz 和 J. Dziarmaga，《Phys. Rev. B》100，165147（2019年）。[28] T. Nishino 和 K. Okunishi，《日本物理学会期刊》66，3040（1997年），https://doi.org/10.1143/JPSJ.66.3040。[29] R. Or´us 和 G. Vidal，《Phys. Rev. B》80，094403（2009年）。[30] V. Zauner-Stauber、L. Vanderstraeten、M. T. Fishman、F. Verstraete 和 J. Haegeman，《Phys. Rev. B》97，045145（2018年）。[31] M. T. Fishman、L. Vanderstraeten、V. Zauner-Stauber、J. Haegeman 和 F. Verstraete，《Phys. Rev. B》98，235148（2018年）。[32] L. Vanderstraeten、J. Haegeman 和 F. Verstraete，《SciPost物理学》讲义，7（2019年）。[33] P. Corboz、T. M. Rice 和 M. Troyer，《物理评论快报》113，046402（2014年）。[34] A. Nietner、B. Vanhecke、F. Verstraete、J. Eisert 和 L. Vanderstraeten，《Quantum》4，328（2020年）。[35] L. Vanderstraeten、L. Burgelman、B. Ponsioen、M. Van Damme、B. Vanhecke、P. Corboz、J. Haegeman 和 F. Verstraete，《Phys. Rev. B》105，195140（2022年）。[36] H. C. Jiang、Z. Y. Weng 和 T. Xiang，《物理评论快报》101，090603（2008年）。[37] P. Corboz、R. Or´us、B. Bauer 和 G. Vidal，《Phys. Rev. B》81，165104（2010年）。[38] H. N. Phien、J. A. Bengua、H. D. Tuan、P. Corboz 和 R. Or´us，《Phys. Rev. B》92，035142（2015年）。[39] A. Rayyan、Q. Luo 和 H.-Y. Kee，《Phys. Rev. B》104，094431 2021（）。[40] J.-W. Li、N. Rao、J. von Delft、L. Pollet 和 K. Liu，《蜂窝Kitaev-$\gamma$ 模型中的自旋双螺旋纠缠》（2022年），arXiv：2206.08946 [凝聚态物理-强关联电子]。[41] H.-J. Liao、J.-G. Liu、L. Wang 和 T. Xiang，《〈物理评论X〉》9，031041（2019年）。[42] J. Hasik、D. Poilblanc 和 F. Becca，《SciPost物理学》10，012 2021（）。[43] N. Xi、H. Chen、Z. Y. Xie 和 R. Yu，《plaquette价键固体与Shastry-Sutherland模型反铁磁相之间的一阶相变》（2021年）。[44] H.-J. Liao，东京ISSP报告（2019年），https://www.youtube.com/watch?v=Z4kTT6SKtVk，访问日期：2023年3月28日。[45] J. Hasik、M. Van Damme、D. Poilblanc 和 L. Vander- straeten，《物理评论快报》129，177201（2022年）。[46] P. Corboz，《Phys. Rev. B》94，035133（2016年）。[47] L. Vanderstraeten、J. Haegeman、P. Corboz 和 F. Ver- straete，《Phys. Rev. B》94，155123（2016年）。[48] X.-Y. Zhang，Vumps Julia软件包，[EB/OL]（2022年），https://github.com/XingyuZhang2018/TeneT.jl，访问日期：2022年3月28日。[49] X.-Y. Zhang，第三节中的应用，[EB/OL]（2022年），https://github.com/XingyuZhang2018/AD-Kitaev，访问日期：2022年3月28日。[50] J. Eisert、M. Cramer 和 M. B. Plenio，《现代物理评论》82，277（2010年）。[51] U. Schollw¨ock

，《现代物理评论》**77** ，259（2005年）。

[52] D. P´erez-Garc´ıa、F. Verstraete、M. M. Wolf 和 J. I. Cirac，《量子信息与计算》7，401（2007年）。[53] P. Corboz、S. R. White、G. Vidal 和 M. Troyer，Phys. Rev. B 84，041108（2011年）。[54] B. Vanhecke、M. V. Damme、J. Haegeman、L. Vander- straeten 和 F. Verstraete，《SciPost物理核心》4，004（2021年）。[55] W. E. Arnoldi，《应用数学季刊》9，17（1951年）。[56] B. Vanhecke、J. Colbois、L. Vanderstraeten、F. Ver- straete 和 F. Mila，《物理评论研究》3，013041（2021年）。[57] J. Nocedal 和 S. Wright，纽约（2006年）。[58] W. Baur 和 V. Strassen，《理论计算机科学》22，317（1983年）。[59] A. Paszke、S. Gross、S. Chintala、G. Chanan、E. Yang、Z. DeVito、Z. Lin、A. Desmaison、L. Antiga 和 A. Lerer，《PyTorch中的自动微分》（2017年）。[60] R. Frostig、M. J. Johnson 和 C. Leary，《机器学习系统》4（2018年）。[61] M. Innes，不要展开伴随：对 SSA形式程序求导（2019年），arXiv:1810.07951 [cs.PL]。[62] M. Seeger、A. Hetzel、Z. Dai、E. Meissner 和 N. D. Lawrence，自动微分线性代数（2019年），arXiv:1710.08717 [cs.MS]。[63] H. Xie、J.-G. Liu 和 L. Wang，Phys. Rev. B 101，245139（2020年）。[64] Y. Saad 和 M. H. Schultz，《SIAM科学与统计计算杂志》7，856（1986年）。[65] R. B. Lehoucq、D. C. Sorensen 和 C. Yang，*ARPACK Users' Guide*（工业与应用数学学会，大学城，费城，1998年）https://epubs.siam.org/doi/pdf/10.1137/1.9780898719628 .

[66] J. Haegeman，面向Krylov子空间方法的Julia软件包，[EB/OL](2022)，https://github.com/Jutho/KrylovKit.jl，访问日期：2022年3月28日。[67] J. G. Rau、E. K.-H. Lee 和 H.-Y. Kee，《物理评论快报》112，077204（2014）。[68] J. c. v. Chaloupka、G. Jackeli 和 G. Khaliullin，《物理评论快报》105，027204（2010）。[69] 与砖墙晶格相比，[24]，这种将两个格点合并的变换包含两倍的物理键，但晶胞数量减半。实践中，我们发现这种方案更有效，因此在后续数值模拟中采用该方案。[70] H.-Y. Lee、R. Kaneko、T. Okubo 和 N. Kawashima，《物理评论快报》123，087203（2019）。[71] I. V. Lukin 和 A. G. Sotnikov，Phys. Rev. B 107，054424（2023）。[72] T. Aoyama、Y. Hasegawa、S. Kimura、T. Kimura 和 K. Ohgushi，Phys. Rev. B 95，245104（2017年）。[73] A. Banerjee、J. Yan、J. Knolle、C. A. Bridges、M. B. Stone、M. D. Lumsden、D. G. Mandrus、D. A. Tennant、R. Moessner 和 S. E. Nagler，《科学》356，1055（2017年）。[74] J. Zheng、K. Ran、T. Li、J. Wang、P. Wang、B. Liu、Z.-X. Liu、B. Normand、J. Wen 和 W. Yu，《物理评论快报》119，227208（2017年）。[75] K. A. Modic、R. D. McDonald、J. P. C. Ruff、M. D. Bachmann、Y. Lai、J. C. Palmstrom、D. Graf、M. K. Chan、F. F. Balakirev、J. B. Betts、G. S. Boebinger、M. Schmidt、M. J. Lawler、D. A. Sokolov、P. J. W. Moll、B. J. Ramshaw 和 A. Shekhter，《自然·物理学》17，240（2021年）。