Zastosowanie sieci tensorowych w obliczeniach procedurą numerycznej grupy renormalizacji

Kacper Wrześniewski, Ireneusz Weymann

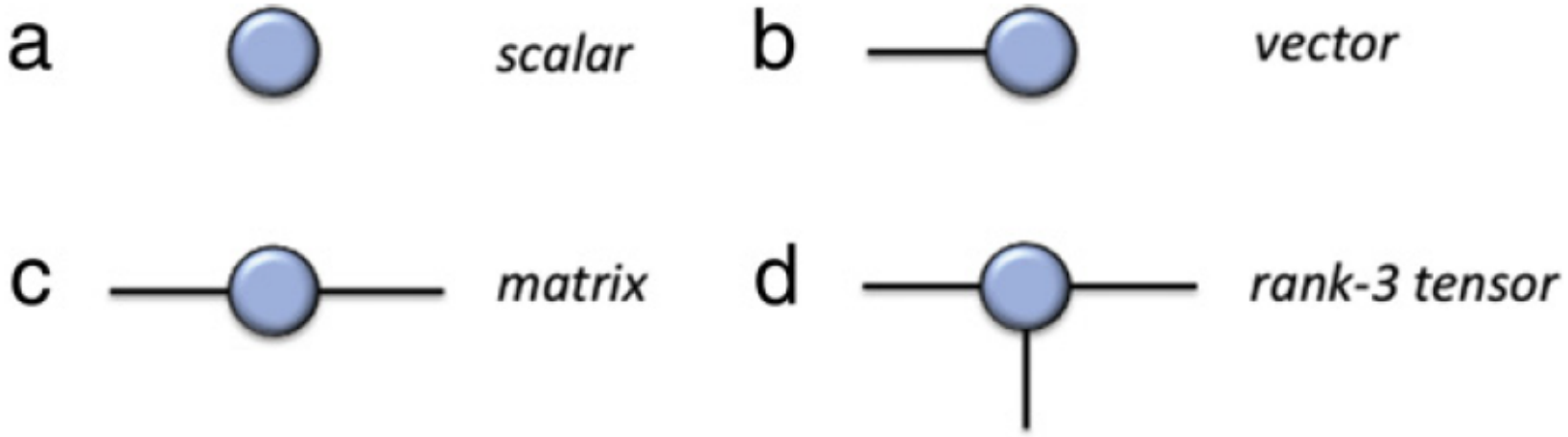
23 maja 2017

Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

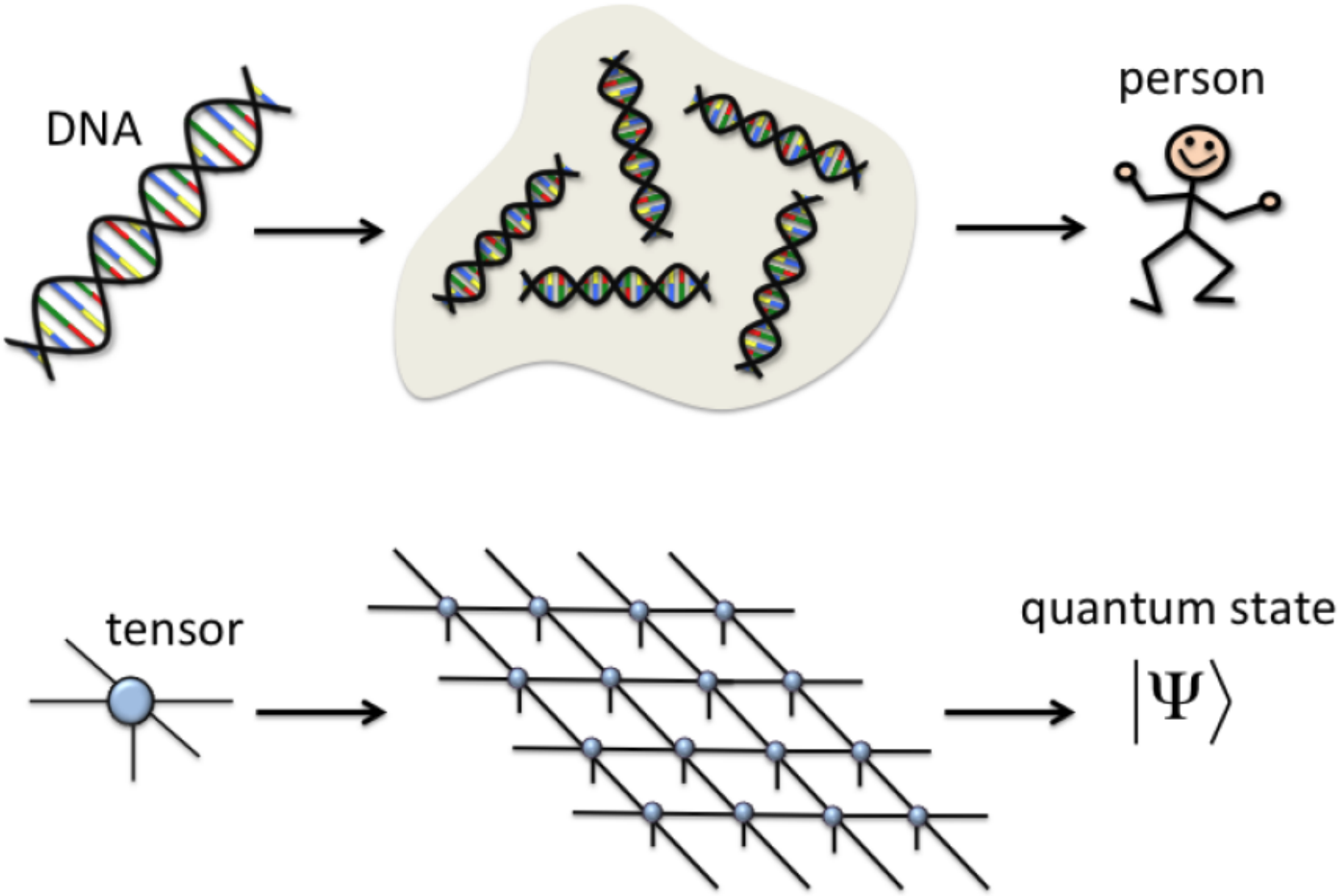
plan prezentacji

- Wstęp do sieci tensorowych,
- Efekt Kondo oraz numeryczna grupa renormalizacji (NRG),
- Zastosowanie sieci tensorowych do procedury NRG,
- Efekt Kondo w transporcie przez rozdzielacz par Coopera.

Wstęp do sieci tensorowych



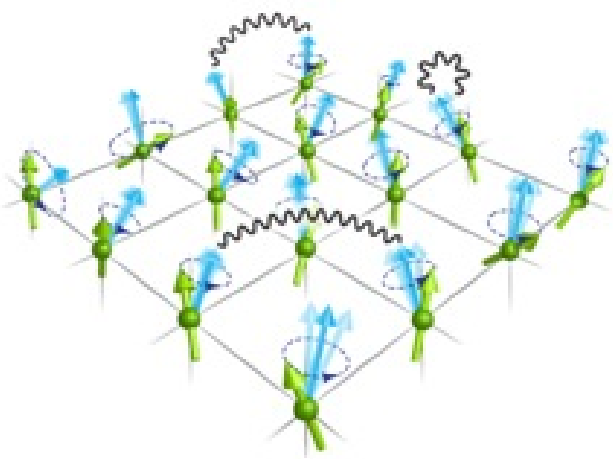
R. Orús / Annals of Physics 349 (2014) 117–158



Rysunek 1: A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states - Román Orús, Annals of Physics, Vol. 349, 117158 (2014)

W fizyce teoretycznej...

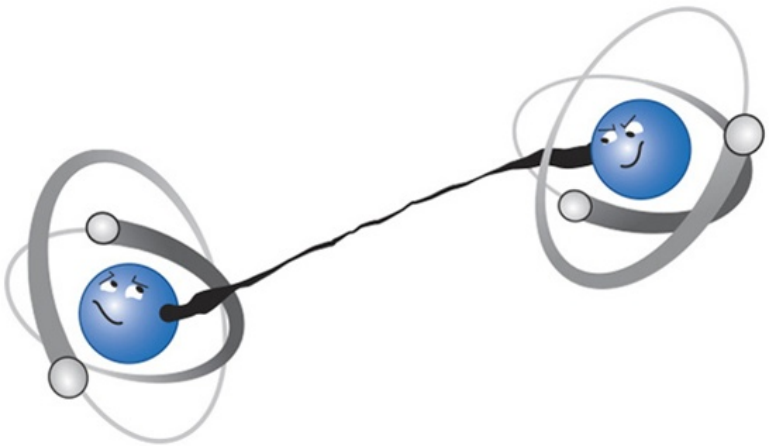
Układy silnie skorelowanych elektronów



- Renormalization algorithms for Quantum-Many Body Systems in two and higher dimensions - F. Verstraete, J. I. Cirac, cond-mat/0407066,
- Variational Quantum Monte Carlo Simulations with Tensor-Network States - A. W. Sandvik, G. Vidal, Phys. Rev. Lett. 99, 220602 (2007),
- ...

Rysunek: www.munich-quantum-center.de

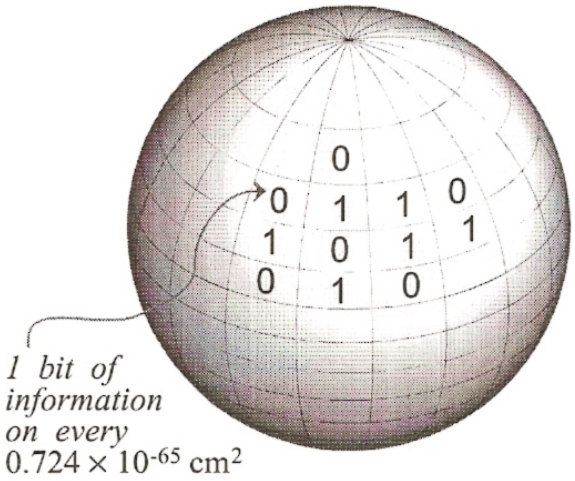
Kwantowe splątanie



- Entanglement classification with matrix product states - M. Sanz, I. L. Egusquiza, R. Di Candia, H. Saberi, L. Lamata and E. Solano, Sci. Rep. 6, 30188 (2016),
- Entanglement Renormalization - G. Vidal, Phys. Rev. Lett. 99, 220405 (2007),
- ...

Rysunek: www.astronomy.com

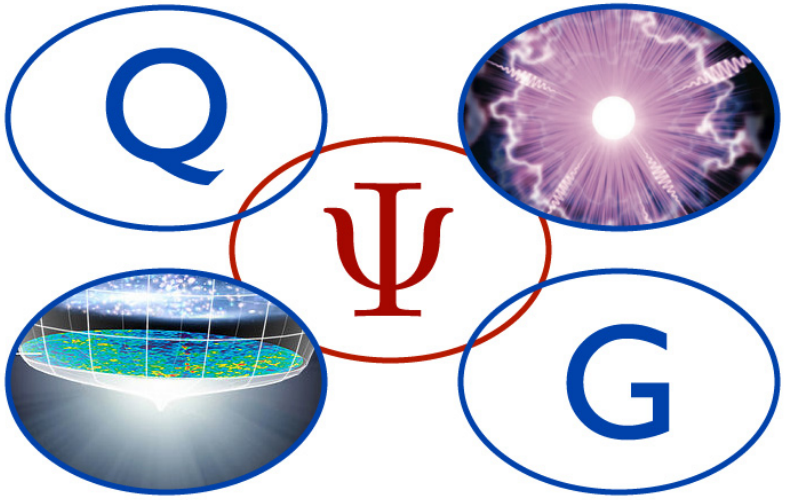
Zasada holograficzna



- Holographic geometries of one-dimensional gapped quantum systems from tensor network states - J. Molina-Vilaplana, JHEP 05, 024 (2013),
- Entanglement renormalization and holography - Brian Swingle, Phys. Rev. D 86, 065007 (2012),
- ...

Rysunek: societyofmodernastronomy.files.wordpress.com

Kwantowa grawitacja

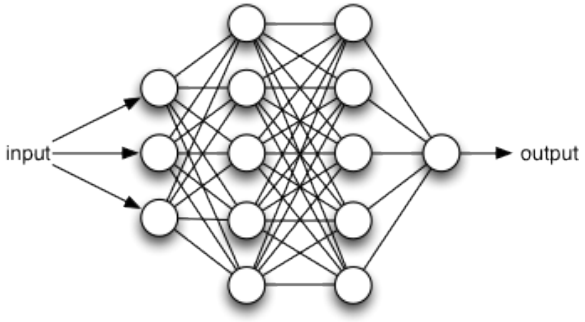


(c) Steve Giddings; black hole image courtesy Don Dixon; expanding universe image WMAP/NASA

- Cool horizons for entangled black holes - Juan Maldacena and Leonard Susskind, Progress of Physics, Vol. 61, 781 (2013),
- Building up spacetime with quantum entanglement - Van Raamsdonk, M. Gen Relativ Gravit (2010) 42: 2323,
- ...

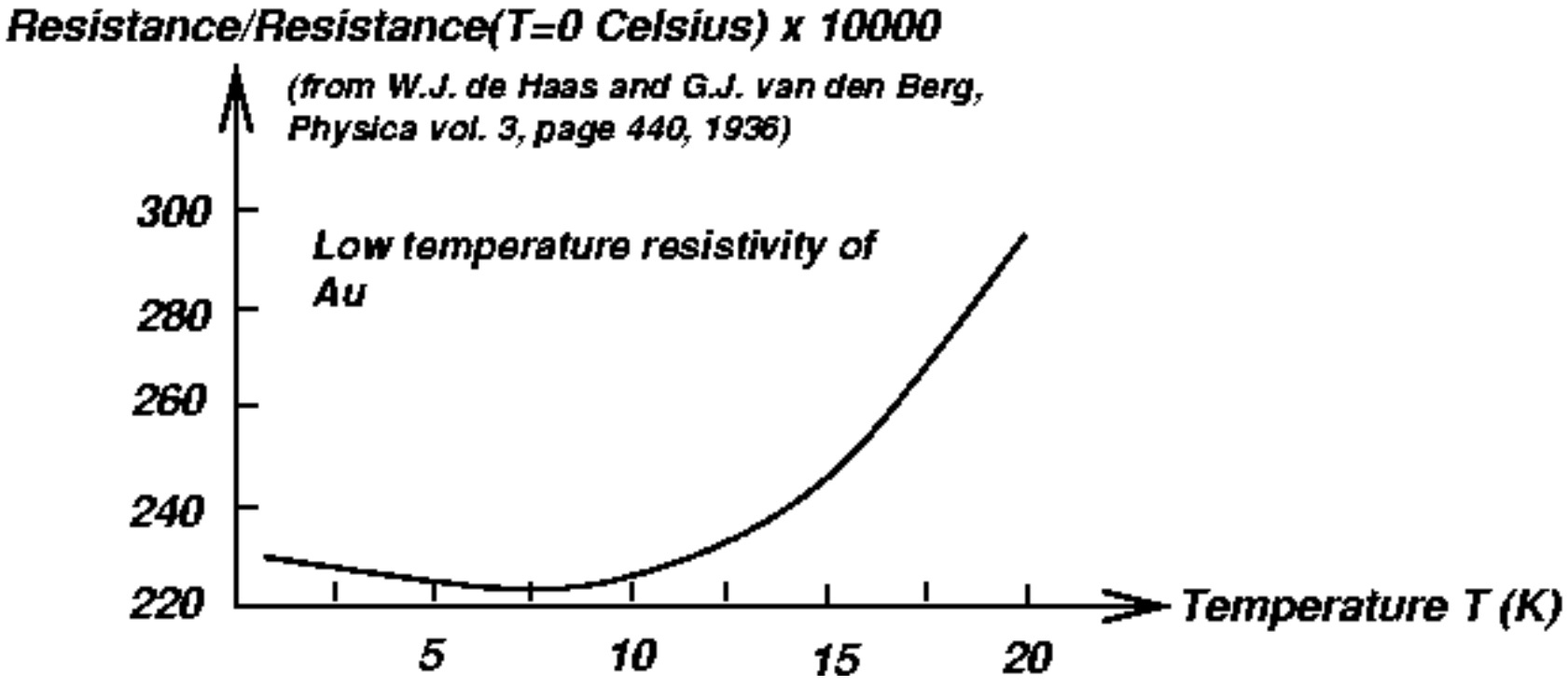
W innych dziedzinach

- Neuronauka,
- teoria automatów,
- sztuczna inteligencja (AI), uczenie maszynowe,
- geometryzacja zagadnień biologicznych: ewolucja, modele epidemii, ...,
- ...



Efekt Kondo

Efekt Kondo


Resistance/Resistance(T=0 Celsius) x 10000
(from W.J. de Haas and G.J. van den Berg,
Physica vol. 3, page 440, 1936)
Low temperature resistivity of
Au
300
280
260
240
220
5
10
15
20
Temperature T (K)

Jun Kondo

Efekt wyjaśniony przez Juna Kondo (rachunek zaburzeń uwzględniający przyblienie trzeciego rzędu).[4]
$\rho(\mathrm{T}) = \rho_0 + \mathrm{aT}^2 + \mathrm{c_m} \ln \frac{\mu}{\mathrm{T}} + \mathrm{bT}^5$

Jun Kondo wyprowadził trzeci człon o logarytmicznej zależności.

Rysunek 2: Jun Kondo. Image courtesy of AIST, Tokyo.

[4] J. Kondo, Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys, Prog. Teor. Phys. 32, 37 (1964).

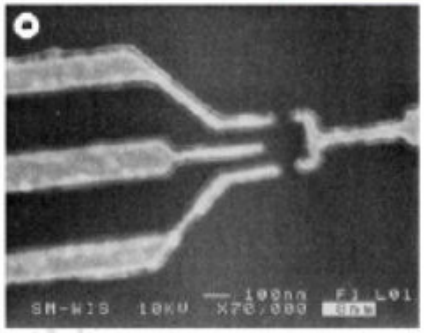
Model Kondo

$$\mathrm{H}_{\mathrm{Kondo}} = \frac{\mathrm{J}}{2}\vec{\mathrm{S}} \sum_{\sigma,\sigma'} \psi_{\sigma}^{\dagger} \vec{\sigma}_{\sigma,\sigma'} \psi_{\sigma'} + \mathrm{H}_{\mathrm{cond}}$$

Model Kondo zawiera spin S oddziałujący lokalnie z nieoddziałującym morzem elektronów przewodnictwa.

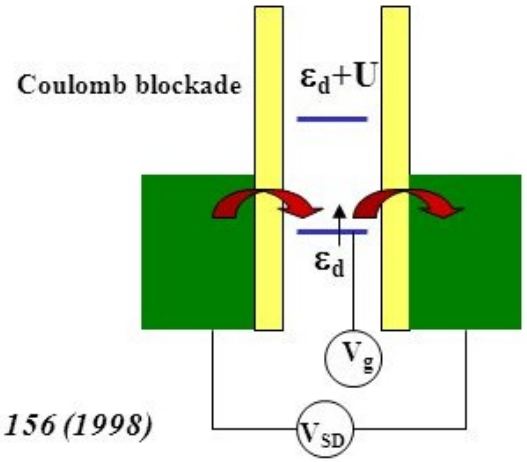
Powstaje chmura elektronowa wokół domieszki, ekranująca jej moment magnetyczny. Ekranujące elektrony mają energię bliską energii Fermiego, przez co pojawia się pik w gęstości stanów. Zwiększone prawdopodobieństwo rozpraszania elektronów przewodnictwa skutkuje wzrostem oporu właściwego.

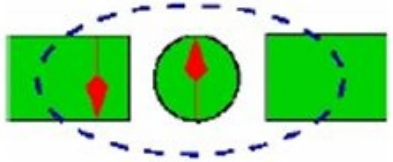
Efekt Kondo w układach kropek kwantowych



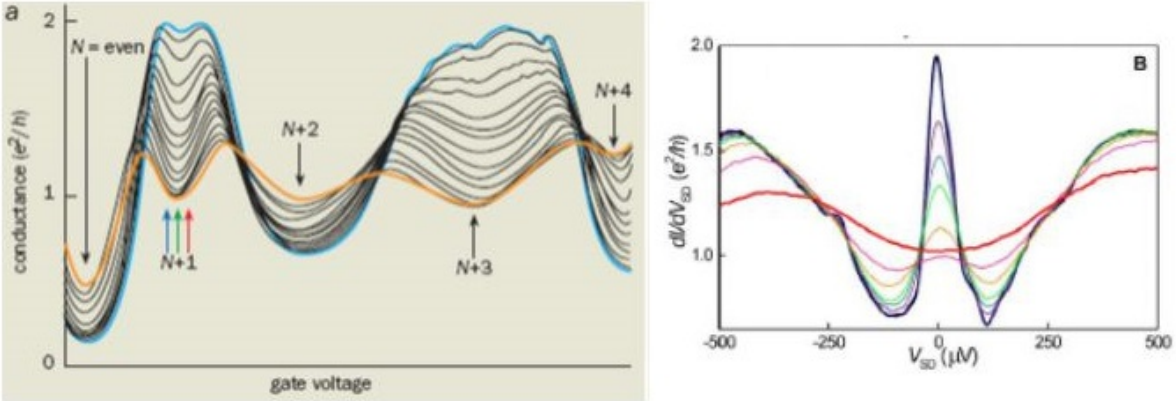
Single quantum dot

Goldhaber-Gorden *et al. nature 391 156 (1998)*





Kondo effect



conductance anomalies

L.Kouwenhoven *et al. science 289, 2105 (2000)*

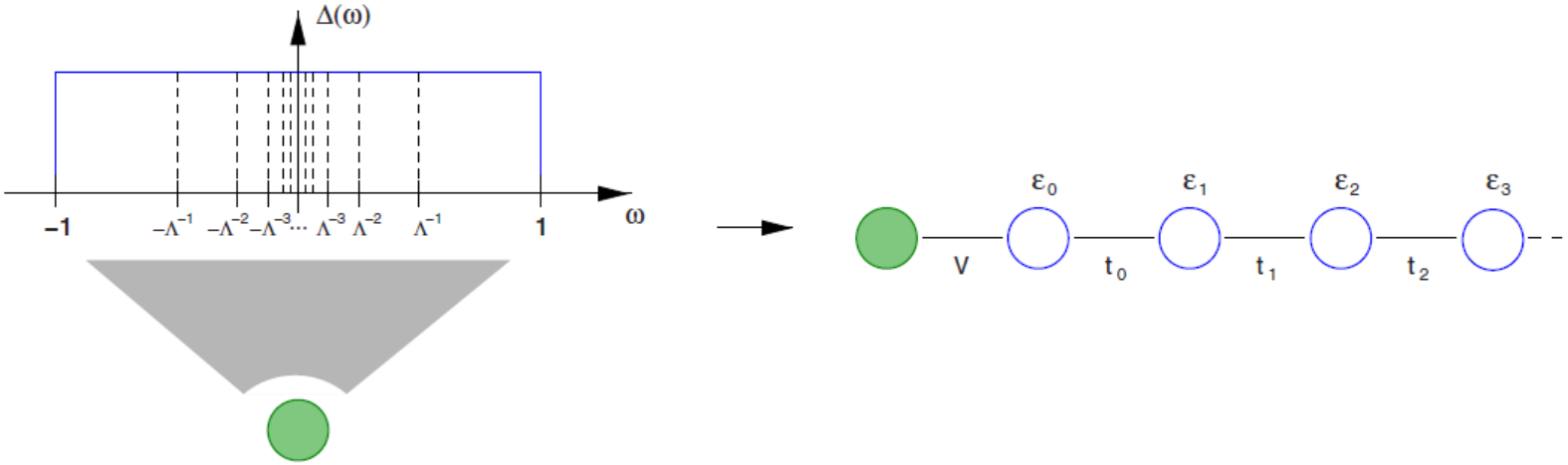
Numeryczna grupa renormalizacji (NRG)

Numeryczna grupa renormalizacji

- Metoda rozwinięta przez K. G. Wilsona (Nagroda Nobla z fizyki 1982 r.),
- nieperturbacyjna metoda rozwiązania modelu Kondo, później rozszerzona dla modelu Andersona,
- obecnie uważana za jedną z najlepszych metod badania układów typu oddziałująca domieszka, z uwzględnieniem różnych korelacji, pozwalająca na wyznaczenie spektrum niskoenergetycznego oraz własności termodynamicznych.

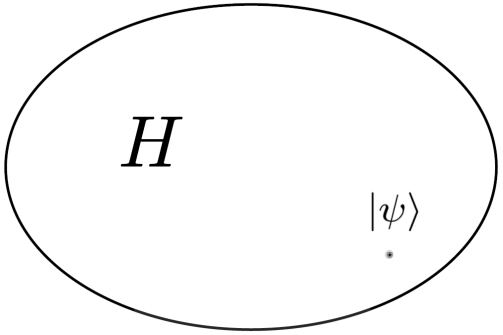
Rysunek 3: K. G. Wilson

Dyskretna logarytmizacja oraz łańcuch Wilsona



Rysunek 4: R. Bulla, T. Costi, T. Pruschke, Rev. Mod. Phys.80, 395 (2008)

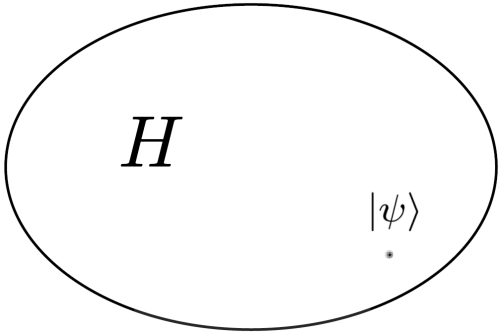
Przestrzeń Hilberta jest ogromna!



- Układ N spinów $\frac{1}{2}$ - wymiar przestrzeni Hilberta 2^{N}.

Tensor networks and the numerical renormalization group - Andreas Weichselbaum (2012)

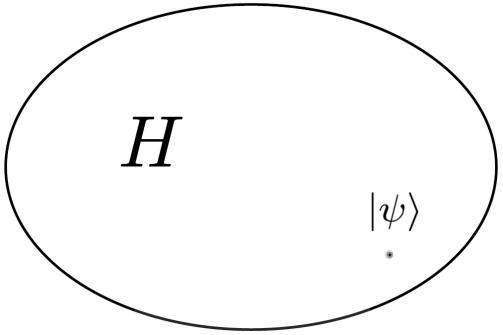
Przestrzeń Hilberta jest ogromna!



- Układ N spinów $\frac{1}{2}$ - wymiar przestrzeni Hilberta 2^{N}.
- Quantum many-body system - układ rozmiaru liczby Avogadro $\sim \mathrm{O}(10^{10^{23}})$ stanów,

Tensor networks and the numerical renormalization group - Andreas Weichselbaum (2012)

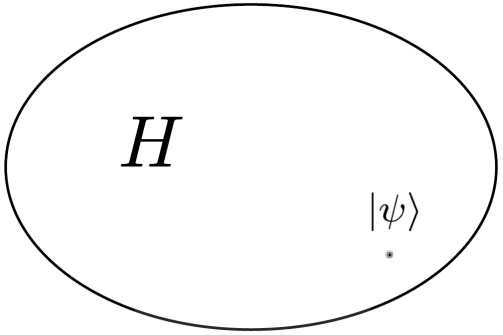
Przestrzeń Hilberta jest ogromna!



- Układ N spinów $\frac{1}{2}$ - wymiar przestrzeni Hilberta 2^{N}.
- Quantum many-body system - układ rozmiaru liczby Avogadro $\sim \mathrm{O}(10^{10^{23}})$ stanów,
- co jest liczbą wiele rzędów wielkości wiekszą niż liczba wszystkich atomów w obserwowalnym Wszechświecie (10^{80}),

Tensor networks and the numerical renormalization group - Andreas Weichselbaum (2012)

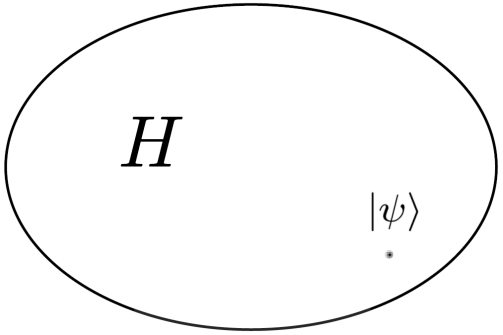
Przestrzeń Hilberta jest ogromna!



- Układ N spinów $\frac{1}{2}$ - wymiar przestrzeni Hilberta 2^{N}.
- Quantum many-body system - układ rozmiaru liczby Avogadro $\sim \mathrm{O}(10^{10^{23}})$ stanów,
- co jest liczbą wiele rzędów wielkości wiekszą niż liczba wszystkich atomów w obserwowalnym Wszechświecie (10^{80}),
- przy obecnie szacowanym wieku Wszechświata około 10^{17}s.

Tensor networks and the numerical renormalization group - Andreas Weichselbaum (2012)

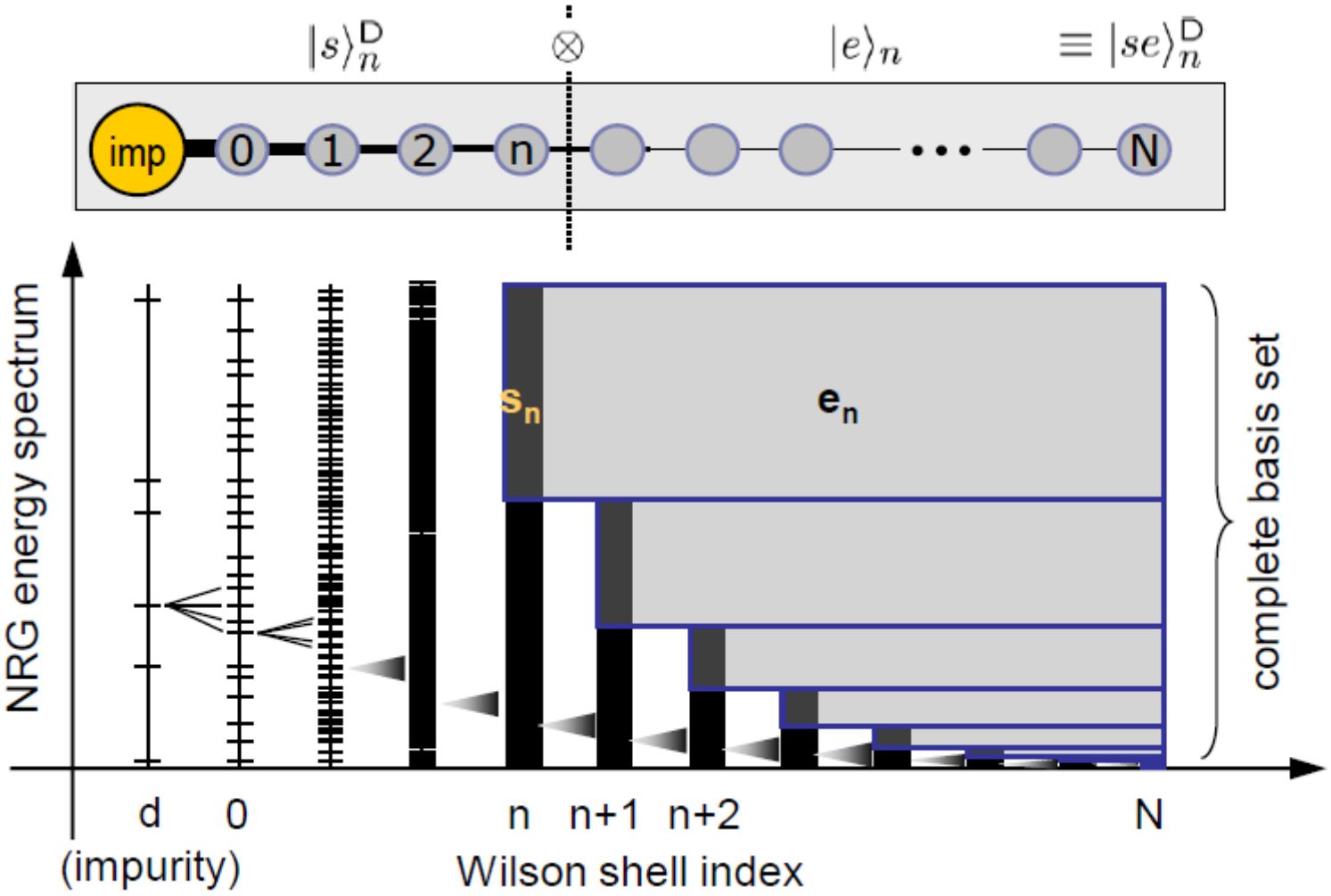
Przestrzeń Hilberta jest ogromna!



- Układ N spinów $\frac{1}{2}$ - wymiar przestrzeni Hilberta 2^{N}.
- Quantum many-body system - układ rozmiaru liczby Avogadro $\sim \mathrm{O}(10^{10^{23}})$ stanów,
- co jest liczbą wiele rzędów wielkości wiekszą niż liczba wszystkich atomów w obserwowalnym Wszechświecie (10^{80}),
- przy obecnie szacowanym wieku Wszechświata około 10^{17}s.
- Na szczęście nie wszystkie stany są tak samo "ważne".

Tensor networks and the numerical renormalization group - Andreas Weichselbaum (2012)

NRG - konstrukcja iteracyjna



Rysunek: Tensor networks and the numerical renormalization group Andreas Weichselbaum Phys. Rev. B 86, 245124 (2012)

NRG + MPS

- Stany NRG wynikające z iteracyjnej procedury możemy zapisać w postaci:

$$|s_n\rangle = \sum_{s_{n-1},\sigma_n} A^{[\sigma_n]}_{s_{n-1},s_n} |\sigma\rangle_n |s\rangle_{n-1}.$$

NRG + MPS

- Stany NRG wynikające z iteracyjnej procedury możemy zapisać w postaci:

$$|s_n\rangle = \sum_{s_{n-1},\sigma_n} A^{[\sigma_n]}_{s_{n-1},s_n} |\sigma\rangle_n |s\rangle_{n-1}.$$

- przestrzeń współczynników $\mathrm{A}^{[\sigma_\mathrm{n}]}_{\mathrm{s_{n-1},s_n}}$ wykonywanej transformacji bardzo łatwo przenieść na zapis w blokach MPS,

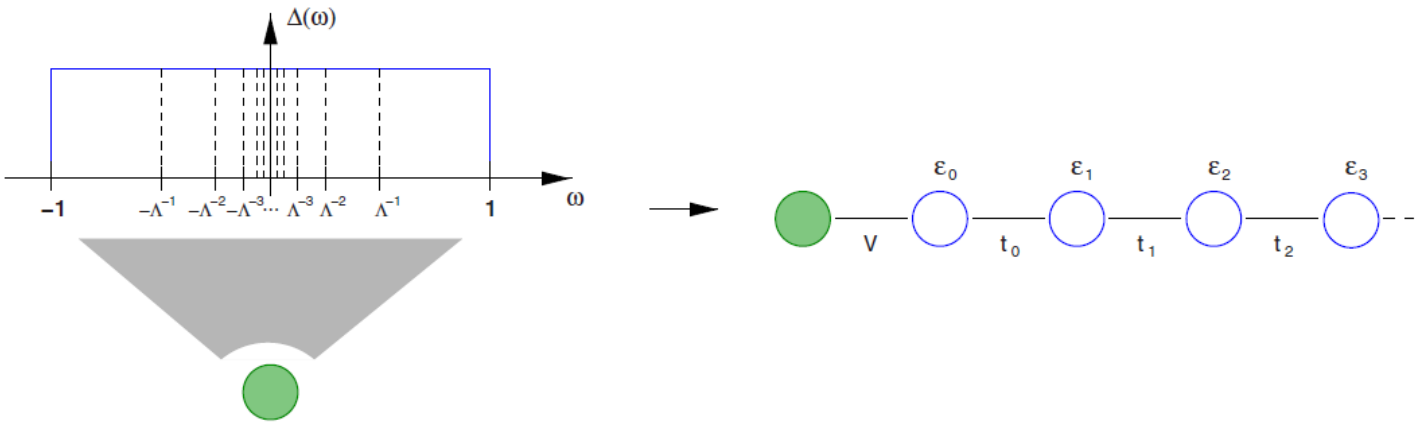
NRG + MPS

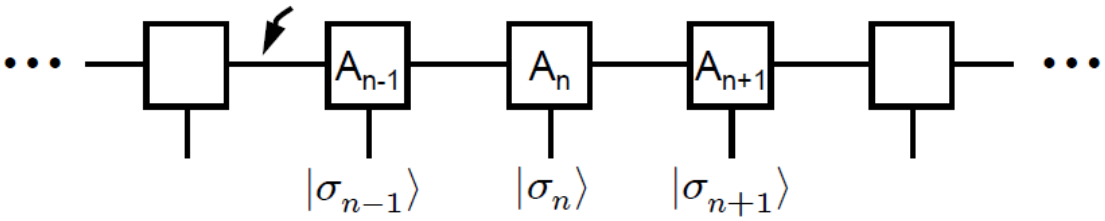
- Stany NRG wynikające z iteracyjnej procedury możemy zapisać w postaci:

$$|s_n\rangle = \sum_{s_{n-1},\sigma_n} A^{[\sigma_n]}_{s_{n-1},s_n} |\sigma\rangle_n |s\rangle_{n-1}.$$

- przestrzeń współczynników $\mathrm{A}^{[\sigma_\mathrm{n}]}_{\mathrm{s_{n-1},s_n}}$ wykonywanej transformacji bardzo łatwo przenieść na zapis w blokach MPS,
- pojedynczy blok opisujący daną podprzestrzeń współczynników jest tensorem trzeciego rzędu.

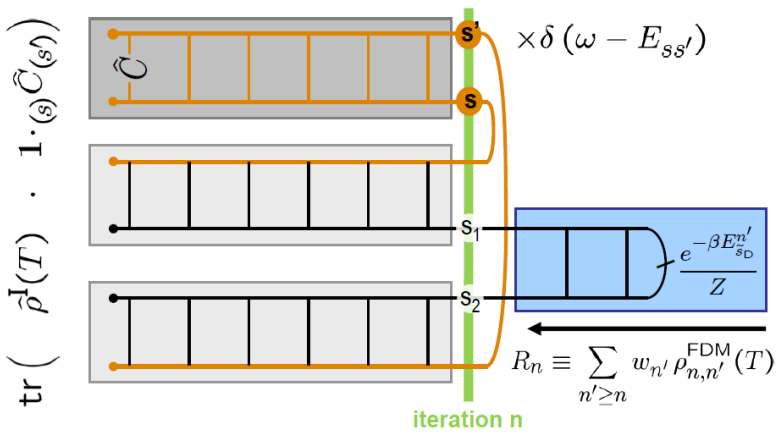
Mapowanie łańcucha Wilsona na sieć tensorową

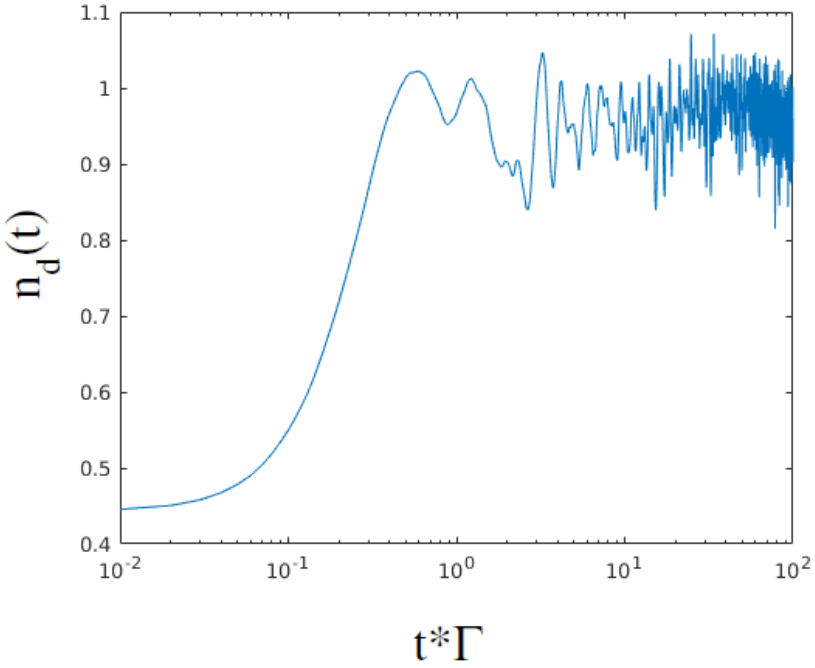




Tensor networks and the numerical renormalization group - Andreas Weichselbaum (2012)

Zastosowanie MPS - badanie czasowej zależności procedurą NRG





Tensor networks and the numerical renormalization group - Andreas Weichselbaum (2012)

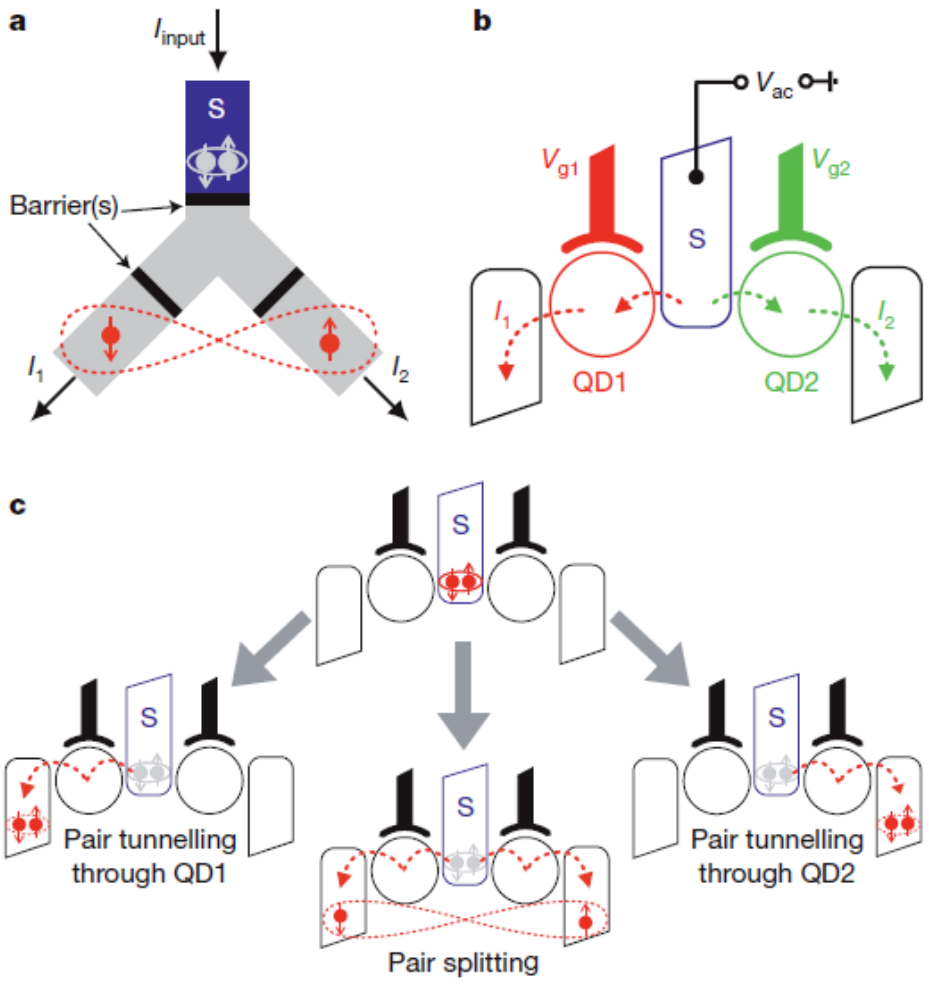
Implementacja NRG - Budapest flexible DM-NRG

Obliczenia wykonane przy pomocy kodu:
Budapest Flexible DM-NRG
O. Legeza, C. P. Moca, A. I. Toth, I. Weymann, G. Zarand,
arXiv:0809.3143 (2008)
Kod dostępny jest na: http://www.phy.bme.hu/∼dmnrg/

Typowe parametry dla pojedynczego przebiegu:
Liczba węzłów Wilsona: N ~ 60,
Liczba zachowywanych stanów na danej iteracji: $> 10^4$,
Całkowita liczba przebiegów pełnej procedury: $> 10^4$.

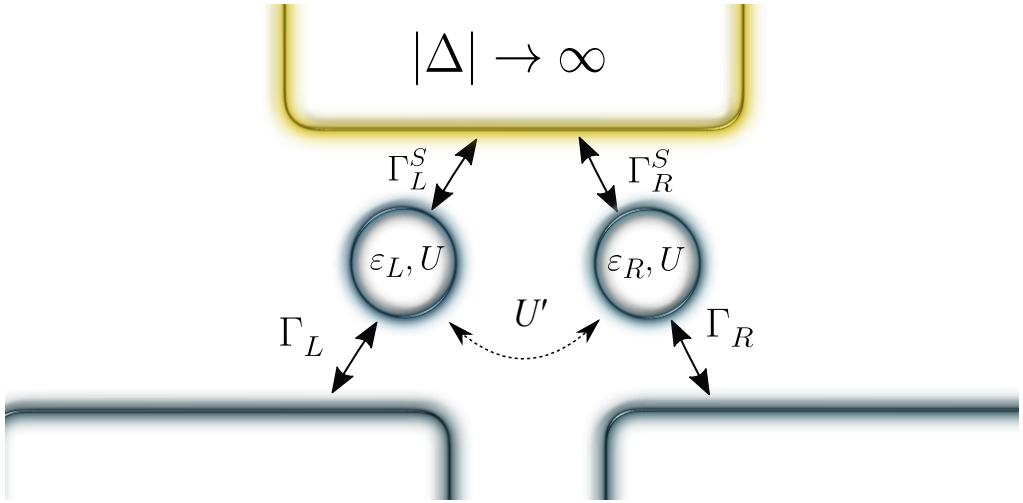
Efekt Kondo w transporcie przez rozdzielacz par Coopera

Rozdzielacz par Coopera



Rysunek 5: Cooper pair splitter - Y-junction.
L. Hoffstetter et. al. Nature 461, 960-963 (2009)

Rozdzielacz par Coopera - model



$$\mathrm{H_{DQD}} = \sum_{\mathrm{j},\sigma} \varepsilon_{\mathrm{j}} \mathrm{d}^\dagger_{\mathrm{j}\sigma} \mathrm{d}_{\mathrm{j}\sigma} + \sum_{\mathrm{j}} \mathrm{U_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}} + \sum_{\sigma,\sigma'} \mathrm{U' n_{1\sigma} n_{2\sigma'}},$$

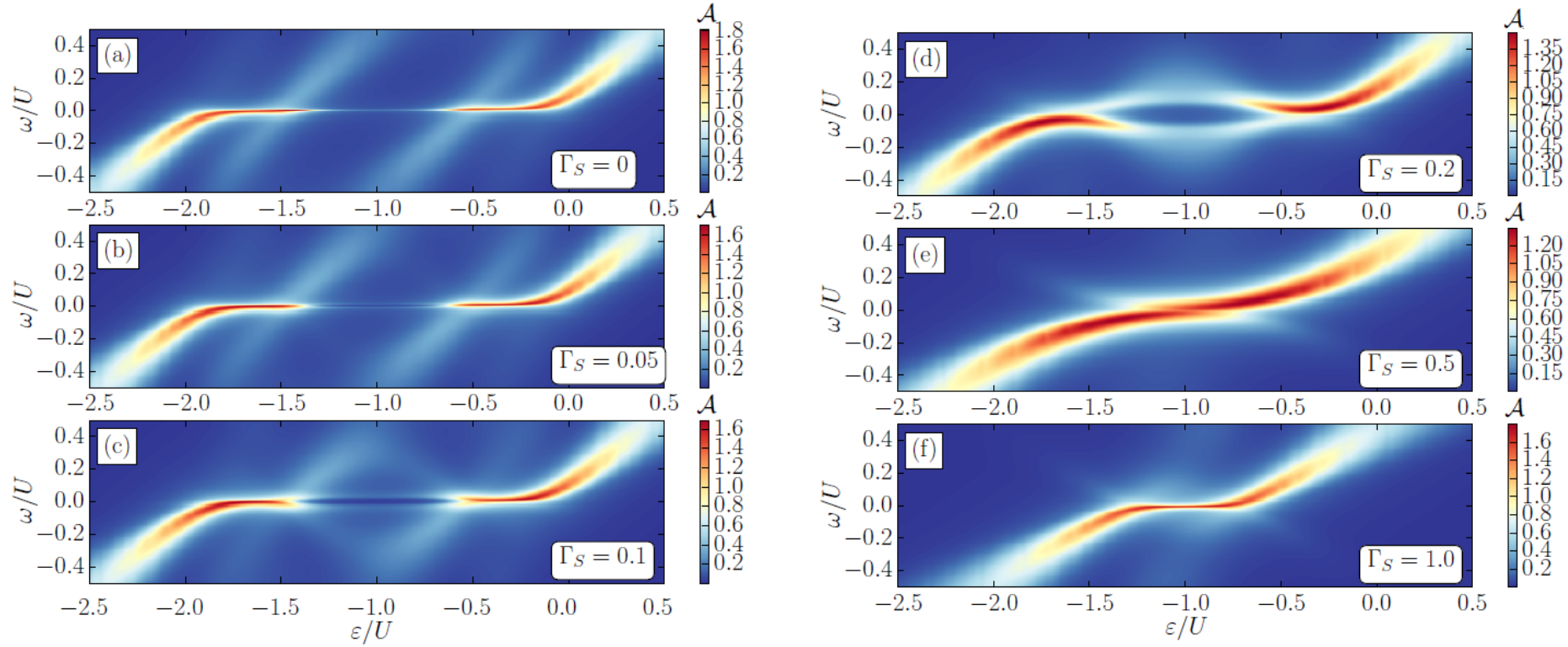
$$\mathrm{H_S} = \sum_{\mathrm{k}\sigma} \xi_{\mathrm{k}} \mathrm{a}^\dagger_{\mathrm{k}\sigma} \mathrm{a}_{\mathrm{k}\sigma} + \Delta \sum_{\mathrm{k}} \left(\mathrm{a}_{\mathrm{k}\downarrow} \mathrm{a}_{-\mathrm{k}\uparrow} + \mathrm{h.c.} \right),$$

$$\mathrm{H_T} = \sum_{\mathrm{jk}\sigma} \left(\mathrm{V_{jk}} \mathrm{c}^\dagger_{\mathrm{jk}\sigma} \mathrm{d}_{\mathrm{j}\sigma} + \mathrm{V^S_{jk}} \mathrm{a}^\dagger_{\mathrm{k}\sigma} \mathrm{d}_{\mathrm{j}\sigma} + \mathrm{h.c.} \right),$$

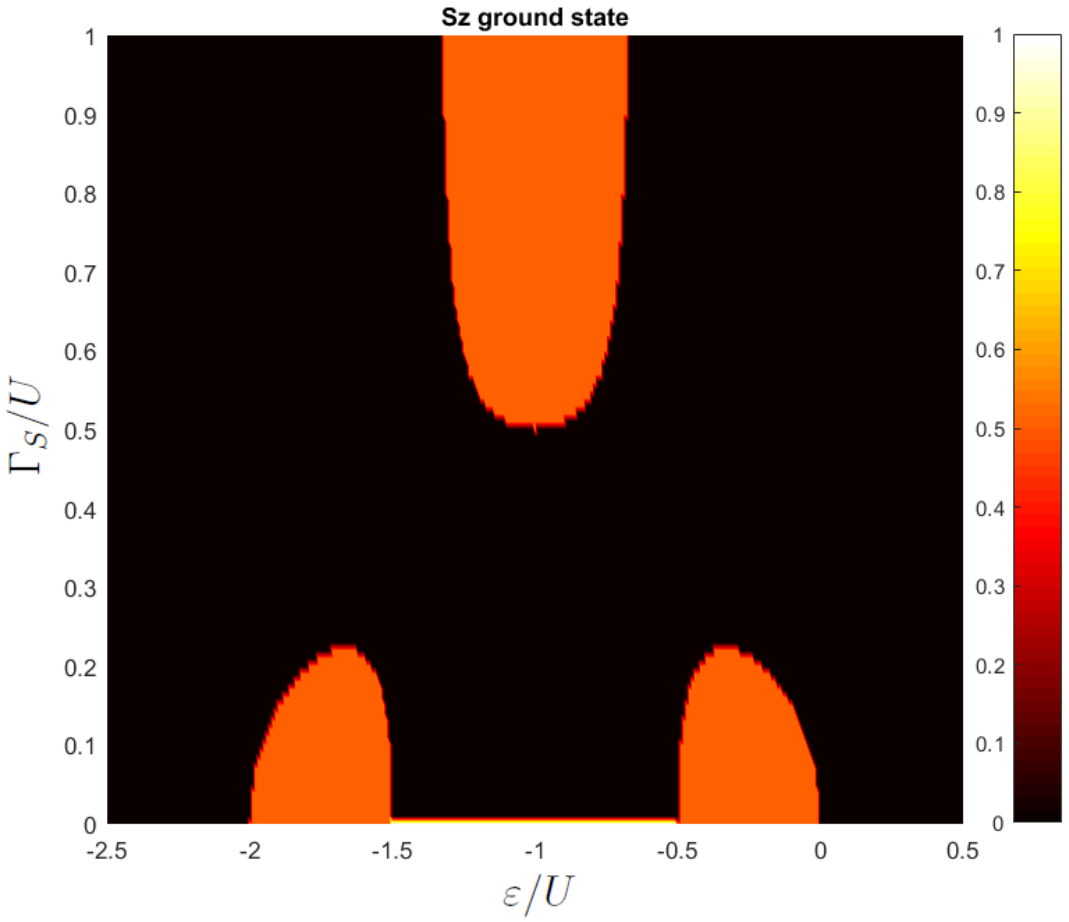
$$\mathrm{H^{eff}_{DQD}} = \mathrm{H_{DQD}} - \sum_{\mathrm{j}} \Gamma^{\mathrm{S}}_{\mathrm{j}} \left(\mathrm{d}^\dagger_{\mathrm{j}\uparrow} \mathrm{d}^\dagger_{\mathrm{j}\downarrow} + \mathrm{d}_{\mathrm{j}\downarrow} \mathrm{d}_{\mathrm{j}\uparrow} \right) +$$

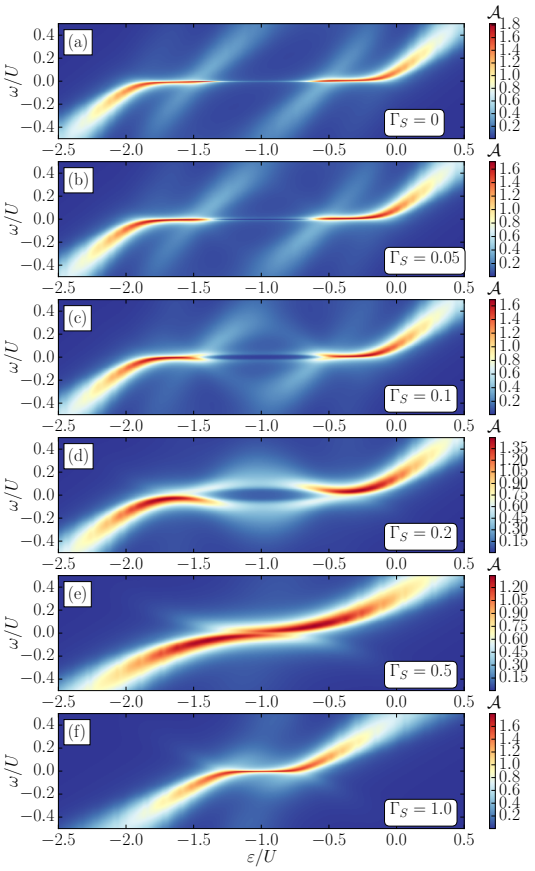
$$\Gamma^{\mathrm{S}}_{12} \left(\mathrm{d}^\dagger_{1\uparrow} \mathrm{d}^\dagger_{2\downarrow} + \mathrm{d}^\dagger_{2\uparrow} \mathrm{d}^\dagger_{1\downarrow} + \mathrm{d}_{2\downarrow} \mathrm{d}_{1\uparrow} + \mathrm{d}_{1\downarrow} \mathrm{d}_{2\uparrow} \right).$$

Rozdzielacz par Coopera - funkcja spektralna

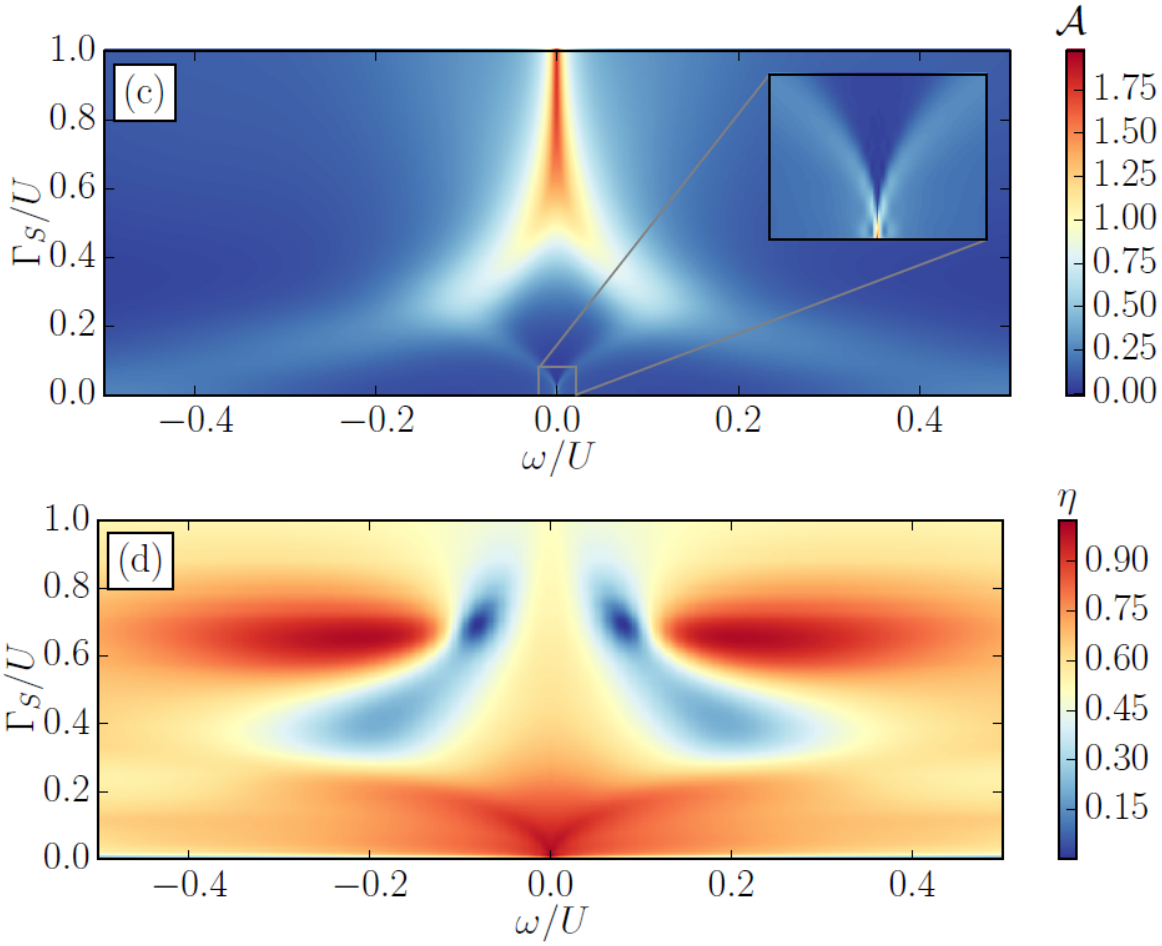


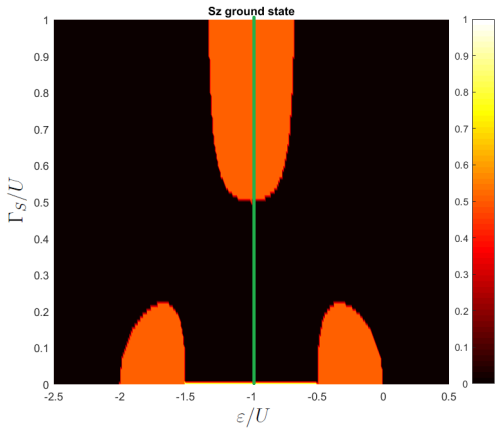
Rozdzielacz par Coopera - stan podstawowy



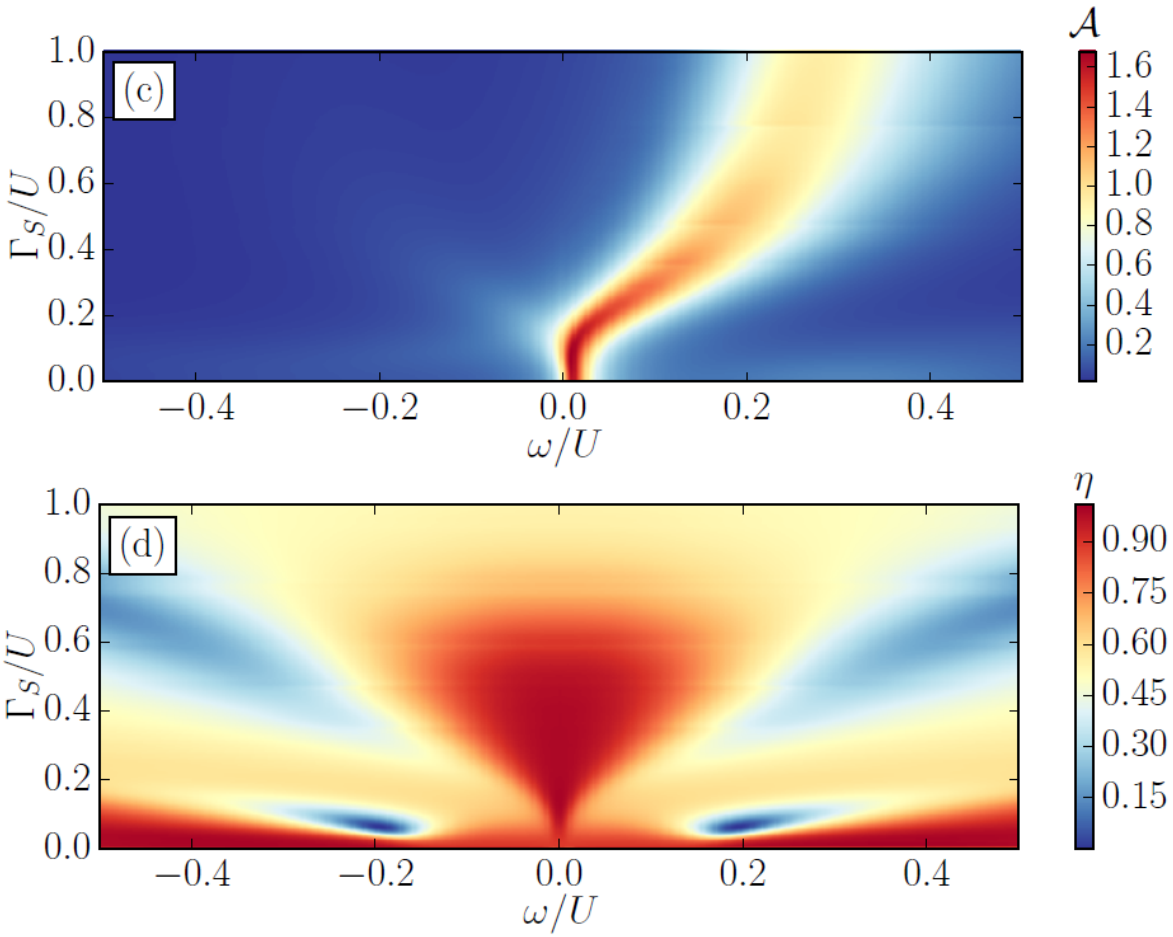


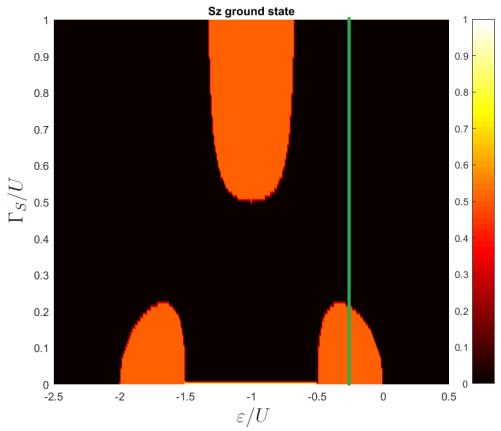
Rozdzielacz par Coopera - reżim SU(2)





Rozdzielacz par Coopera - reżim SU(4)





Dziękuję za uwagę.