

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ РЕШЕТКАХ

А.В. Вильдеманов¹, М.В. Иванченко¹, Т.В. Лантева²

¹*Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского*

²*Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Dresden, Germany*

Введение

Локализация колебаний и распространение волн в зависимости от характера пространственных неоднородностей среды – одно из фундаментальных явлений волновой физики. С 50-х годов XX века известен феномен андерсоновской локализации, заключающийся в том, что пространственная неоднородность в *линейном* периодическом потенциале приводит к локализации волн, экспоненциально слабому транспорту (электрического заряда, механических колебаний). Проблема андерсоновской локализации в *нелинейных* системах, системах с *взаимодействием* между квантовыми частицами до сих пор оставалась открытой.

Развитая нами теория нелинейной андерсоновской локализации предсказывает, что для разрушения андерсоновской локализации достаточно взаимодействия между двумя частицами, а в классическом (многочастичном) пределе локализация приобретает вероятностные свойства [1,2]. Ее верификация в численных экспериментах представляет собой исключительно сложную задачу, поскольку достоверное измерение делокализации волновых пакетов и характеристик диффузии требует численного интегрирования больших систем дифференциальных уравнений (на решетке как минимум $(5 \times 10^3) \times (5 \times 10^3)$) на больших временных интервалах (как минимум 10^6 шагов интегрирования) для большого набора реализаций пространственной неоднородности (порядка 100 реализаций). На современных вычислительных ресурсах типичное время работы последовательной программы для одной такой реализации составляет несколько недель.

Применение технологий параллельного программирования позволило нам существенно продвинуться вперед в решении этой проблемы. Поскольку задача относится к классу задач SIMD (single instruction multi data), здесь целесообразно использовать графический ускоритель. Дополнительным плюсом использования GPU является то, что на одном вычислительном узле, как правило, находится несколько графических карт, которые можно использовать параллельно. В качестве технологии программирования была выбрана CUDA, а схема численного интегрирования – из класса симплектических методов (pq-метод [3]). Для двухчастичной задачи на одномерной решетке пространство данных представляет собой двумерный симметричный массив значений амплитуд вероятности волновой функции (так как частицы, в силу физической постановки задачи, обладают бозе-статистикой и неразличимы). Для вычисления функции-интегратора можно использовать ядро с двумерной сеткой нитей, что позволяет обработать все элементы массива. Поскольку взаимодействие между частицами локально, в CUDA ядре можно ограничиться использованием только глобальной памяти. В результате длительность выполнения вычислительной задачи с теми же параметрами, что и в последовательной версии, на одной графической карте Tesla M2070 удалось снизить до 1 дня.

Работа выполнена при поддержке фонда «Династия», грантов Президента РФ МК-4028.2012.2 и РФФИ 12-02-31403, а также в сотрудничестве с Институтом Макса Планка физики сложных систем, Дрезден.

Литература

1. Flach S., Ivanchenko M.V., Khomeriki R. Correlated metallic two-particle bound states in quasiperiodic chains // *Europhysics Letters*. 98. 66002 (2012).
2. Ivanchenko M.V., Lapyeva T.V., Flach S. Anderson localization or nonlinear waves: A matter of probability // *Physical Review Letters*. 107. 240602 (2011).
3. Skokos Ch., Krimer D.O., Flach S., Komineas S. Delocalization of wave packets in disordered nonlinear chains // *Phys. Rev. E* 79. 056211 (2009).