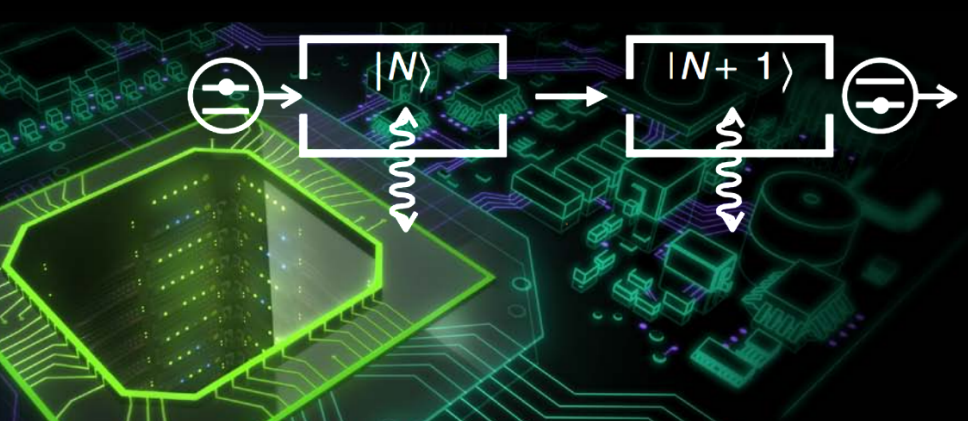
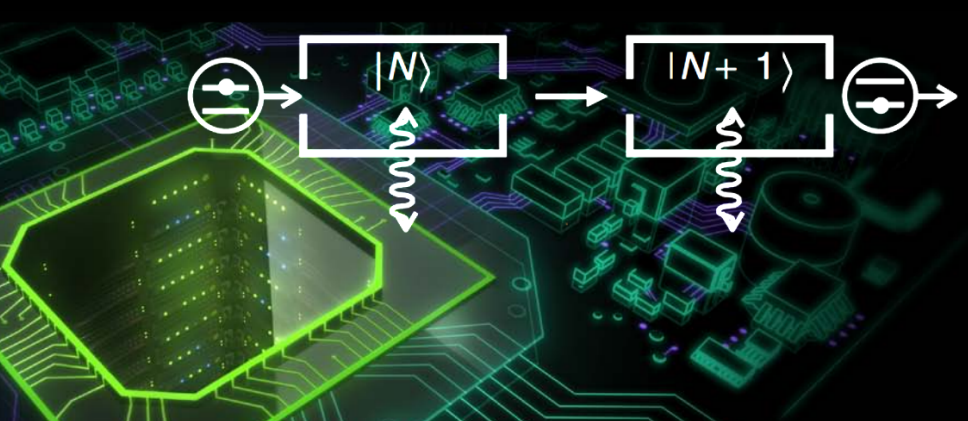




ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА КВАНТОВЫХ МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМ

С.В. Денисов, Т.В. Лаптева
ф-т ВМК



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА КВАНТОВЫХ МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМ

С.В. Денисов, Т.В. Лаптева
ф-т ВМК

Состав группы

"Теоретики"

- ▶ С. В. Денисов
- ▶ Т. В. Лаптева
- ▶ М. В. Иванченко
- ▶ И. И. Юсипов

"Вычислители"

- ▶ И. Б. Мееров
- ▶ Е. А. Козинов
- ▶ А. В. Линев
- ▶ В. Д. Волокитин

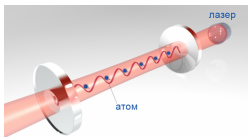
ПЛЮС



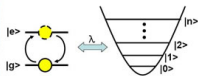
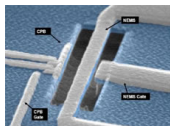
а также вычислительный кластер Института физики сложных систем (MPIPKS), Дрезден

Мотивация

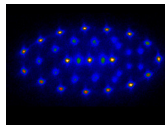
Квантовые электродинамические резонаторы



Наномеханические системы в квантовых режимах



Системы нескольких ультрахолодных атомов



Эти квантовые системы **слишком малы и неоднородны** для описания с помощью "усредняющих" среднеполевых моделей и **слишком велики** для того, что бы моделировать их на стандартных компьютерах.

Основные Проблемы вычислительной квантовой физики

Классические системы

- ▶ число переменных в модельных уравнениях M растет **линейно** с увеличением числа частиц (или степеней свободы) N в системе, $M \propto N$;
- ▶ состояние системы описывается M **действительными** числами;
- ▶ интегрирование модельных уравнений во времени: огромное число алгоритмов гарантирующих высокую точность сохранения характеристик системы (энергии, импульса итд).

Квантовые системы

- ▶ число переменных в модельных уравнениях M растет **экспоненциально** с увеличением числа частиц (или степеней свободы) N , $M \propto e^{\alpha N}$;
- ▶ состояние системы описывается M **комплексными** числами;
- ▶ алгоритмы интегрирования должны гарантировать не только сохранение абсолютных значений (нормы итд), но и **точную эволюцию фаз** (интерференция квантовых состояний).

Цель проекта: моделирование *открытых* и *периодически-модулированных* квантовых систем

Задачи проекта

- ▶ достижение в модельных симуляциях режимов **квантовых аттракторов**, асимптотических состояний открытых неравновесных квантовых систем;
- ▶ разработка **численно-точных алгоритмов** нахождения состояний сложных периодически-модулированных систем;
- ▶ численное исследование квантовых аттракторов;
- ▶ моделирование многочастичных **квантовых рэчетов**;
- ▶ нахождение собственных состояний **квантовых потенциалов с беспорядком** в режиме периодической модуляции.

Открытые квантовые системы

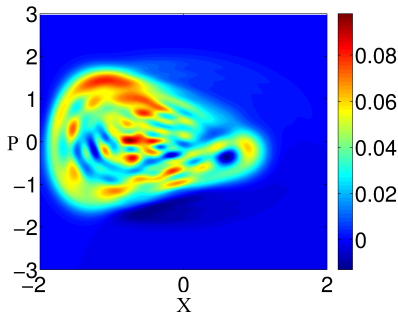
Уравнение эволюции

$$\dot{\varrho} = [H(t), \varrho] - i\mathcal{L}[\varrho] = \mathcal{L}_{\text{super}}(t)[\varrho], \quad H(t+T) = H(t)$$

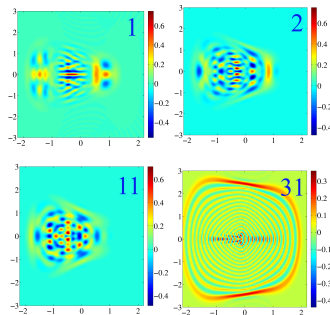
- ▶ состояние системы описывается уже не N -вектором (волновой функцией), а $N \times N$ матрицей (матрицей плотности);
- ▶ динамика системы определяется не $N \times N$ матрицей (гамильтонианом), а $N^2 \times N^2$ суперматрицей $\mathcal{L}_{\text{super}}(t)$, зависящей от времени;
- ▶ квантовый аттрактор, $\varrho^A(t) = \varrho^A(t+T)$, - устойчивое периодическое решение уравнения;
- ▶ его нахождение требует двух последовательных операций, а именно (i) **пропагации** N^2 векторов на время T и (ii) **диагонализации** полученной $N^2 \times N^2$ суперматрицы так называемого “пропагатора” $U(T)$.

Реализация: квантовый осциллятор Дюффинга

Стробоскопическое
распределение Вигнера
квантового аттрактора ϱ^A



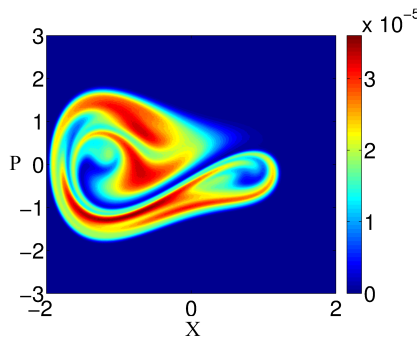
Собственные состояния
(состояния Флоке) квантового
гамильтониана



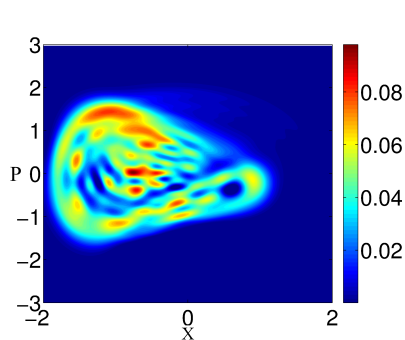
$$\gamma = 0.05, \mathcal{T} = 3$$

Мы удержали $N = 223$ состояний Флоке $\rightarrow$
диагонализация суперматрицы размером $49\,729 \times 49\,729$.

Benchmark: классический аттрактор vs квантовый

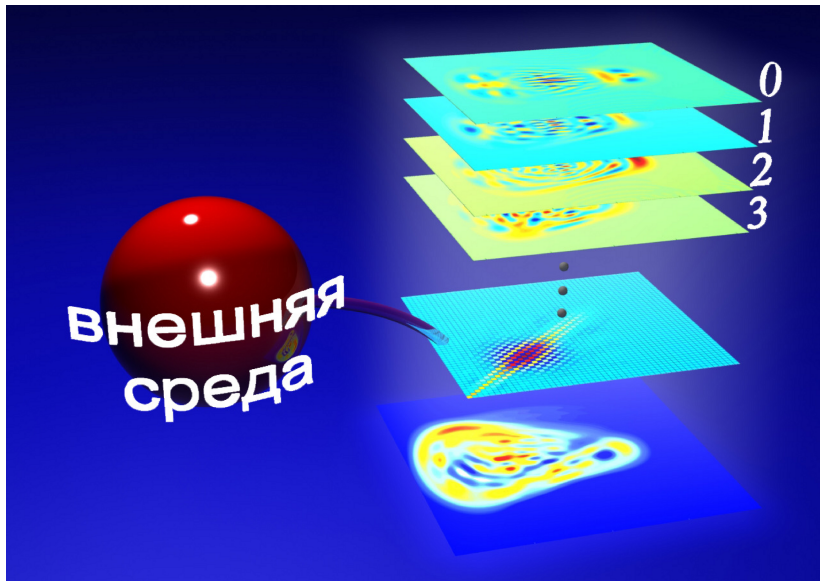


$$\gamma = 0.05, \mathcal{T} = 3$$



$$\gamma = 0.05, \mathcal{T} = 3$$

Декогеренция как интерференция



Алгоритм нахождения состояния Флоке сложных квантовых систем

Уравнение эволюции

$$|\dot{\varphi}(t)\rangle = H(t)|\varphi(t)\rangle, \quad H(t+T) = H(t)$$

- ▶ состояние системы описывается набором N -векторов (состояний Флоке), который переходят сами в себя после эволюции на один период T ;
- ▶ однако $N = 5\,000 \div 10\,000$;
- ▶ нахождение состояний Флоке системы такого размера требует максимальной точности пропагации (сохранение фаз итд) для гамильтонианов явно зависящих от времени;
- ▶ наша идея состоит в комбинации (i) разложения Магнуса и (ii) эволюции с помощью разложения по полиномам Чебышева.

Алгоритм нахождения состояния Флоке сложных квантовых систем

Наша идея состоит в комбинации (i) разложения Магнуса и (ii) эволюции с помощью разложения по полиномам Чебышева.

Текущие результаты (кластер “Лобачевский”)

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
	N	pr	время коммуникаций	время чебышева	LAPACK_z deev	время omega pre	время omega	общее время	ускорение чебышева	ускорение	последовательная часть	NZ	общее время оценка	ускорение оценка
5	3001	1	0.13	2395.71	108.72	172.59	10.53	2687.68	1.00	1.00	281.31	20000	9,625,253.44	1.00
5	3001	2	0.59	1200.13	108.63	172.59	10.51	1492.45	2.00	1.80	281.22	20000	4,842,841.81	1.99
5	3001	3	0.66	804.16	108.59	172.59	10.88	1096.88	2.98	2.45	281.18	20000	3,260,433.84	2.95
5	3001	4	0.14	602.32	108.38	172.59	10.74	894.16	3.98	3.01	280.97	20000	2,452,493.10	3.92
5	3001	5	0.53	482.06	108.70	172.59	10.72	774.59	4.97	3.47	281.29	20000	1,971,381.82	4.88
5	3001	6	0.65	402.79	108.45	172.59	9.78	694.27	5.95	3.87	281.04	20000	1,650,581.70	5.83
5	3001	7	0.73	346.31	108.62	172.59	10.18	638.43	6.92	4.21	281.21	20000	1,426,229.95	6.75
5	3001	8	0.49	304.40	107.02	172.59	10.41	594.91	7.87	4.52	279.61	20000	1,259,516.10	7.64
5	3001	9	2.09	270.05	108.39	172.59	10.36	563.49	8.87	4.77	280.98	20000	1,121,919.08	8.58
5	3001	10	1.25	245.99	107.22	172.59	9.76	536.81	9.74	5.01	279.81	20000	1,023,269.06	9.41

число процессоров = 10

число состояний = 3001

ускорение = 9.4

Публикации группы (2014), ННГУ

- ▶ D. Denisov, S. Flach, and P. Hänggi, *Tunable transport with broken space-time symmetries*, Phys. Reports, **538**, 77 (2014) (IF 23);
- ▶ A. Rebenstock, S. Denisov, P. Hänggi, and E. Barkai, *Infinite densities in strong anomalous diffusion*, Phys. Rev. Lett. **112**, 110601 (2014) (IF 7.7)
- ▶ M. V. Ivanchenko, T. V. Lapyeva, and S. Flach, *Quantum chaotic subdiffusion in random potentials*, Phys. Rev. B **89**, 060301 (2014) (IF 3.6).

Планируемые публикации группы на 2015 г.

принятые к печати/отосланные

- ▶ C. Grossert, M. Leder, S. Denisov, P. Hänggi, and M. Weitz *Detecting Floquet resonances with directed transport of ultracold atoms*, Phys. Rev. Lett. (принято к печати) (**IF 7.7**) (arxiv.org/1407.0605);
- ▶ T. V. Lapyeva, A. A. Tikhomirov, O. I. Kanakov, and M. V. Ivanchenko *Anderson localization in active arrays* (arxiv.org/1410.6036).

в стадии написания

- ▶ S. Denisov, T. V. Lapyeva, J. Thingna, M. V. Ivanchenko, and P. Hänggi, *Quantum attractors: asymptotic states of ac-driven open systems*;
- ▶ T. V. Lapyeva, B. I. Meerov, E. A. Kozinov, M. V. Ivanchenko, and S. Denisov, *Magnus-Chebyshev propagator: a scalable algorithm to find Floquet states of big quantum systems*.

СПАСИБО
ЗА ВНИМАНИЕ
И ПОДДЕРЖКУ ПРОЕКТА!