
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИССИПАТИВНОЙ ДИНАМИКИ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИЙ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА GPU

Мартынов В.О., Миронов В.А., Смирнов Л. А.

Нижний Новгород, 2015



ОТКРЫТЫЕ КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

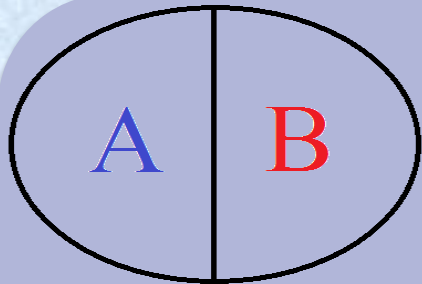
1. Квантовая информатика
 - Квантовые вычисления
 - Квантовая криптография
2. Не классические состояние света
3. Классические компьютеры
4. Биологические системы

ОПИСАНИЕ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Для изолированной системы
можно ввести вектор состояния $|\Psi\rangle$

Это состояние подчиняется
уравнению Шредингера $\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\Psi\rangle$

Размерность задачи M – число уровней



Для изолированной системы можно
ввести матрицу плотности

$$\hat{\rho}_{AB} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

Матрица плотности для подсистемы: $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_{AB})$

На матрицу плотности часто можно написать уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_A = \vec{R}\hat{\rho}_A - \text{размерность задачи } M^2$$

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

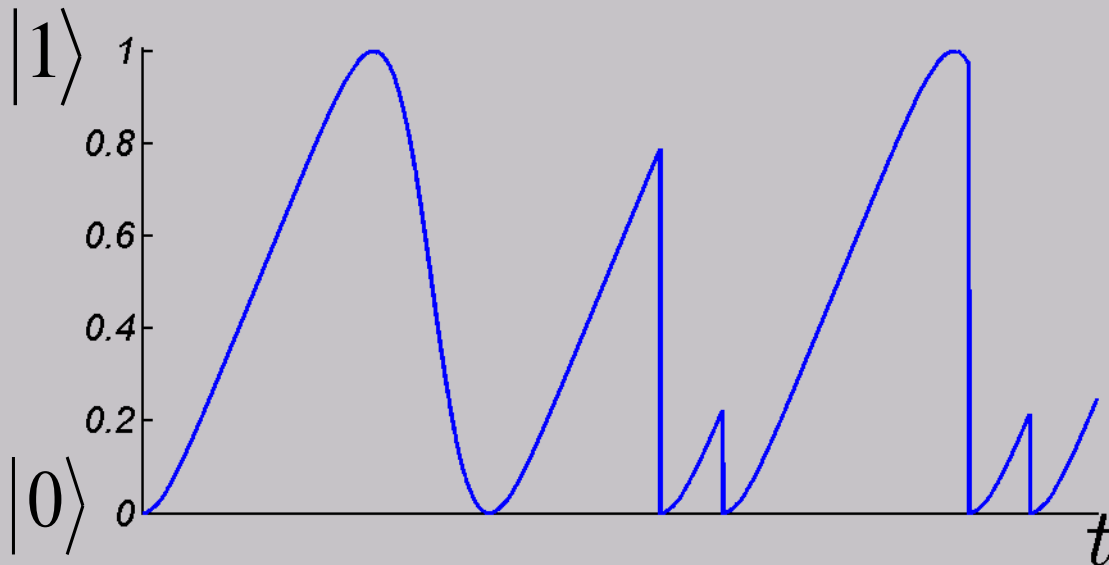
Эволюция вектора состояния системы $|\Psi\rangle$

=

Эволюция с эффективным гамильтонианом $\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{eff}|\Psi\rangle$

+

Квантовые скачки с вероятностью $\propto \langle\Psi|\hat{I}|\Psi\rangle$



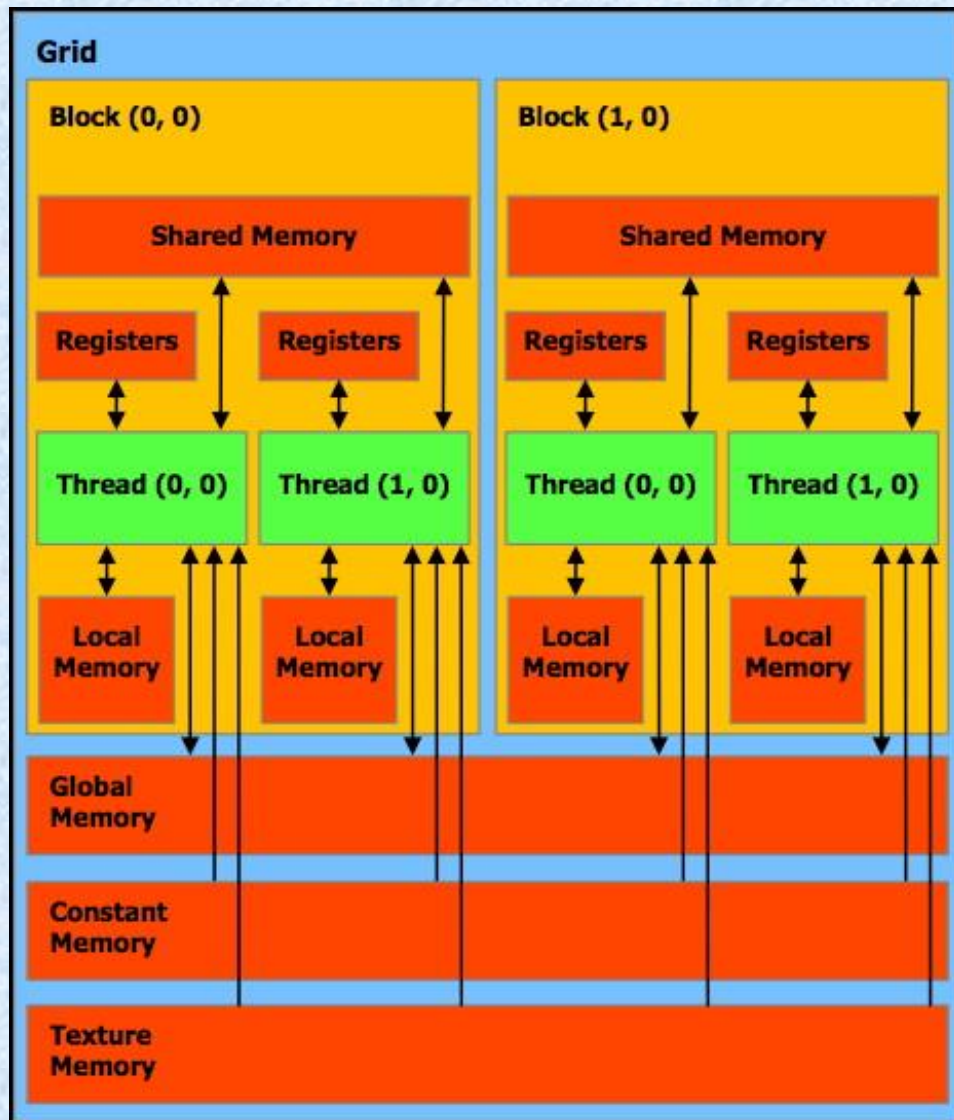
ПРЕИМУЩЕСТВА МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

1. Удобен для распараллеливания
2. Меньшие требования к объему памяти
3. Не всегда получается написать уравнение на матрицу плотности

АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ



АРХИТЕКТУРА GPU

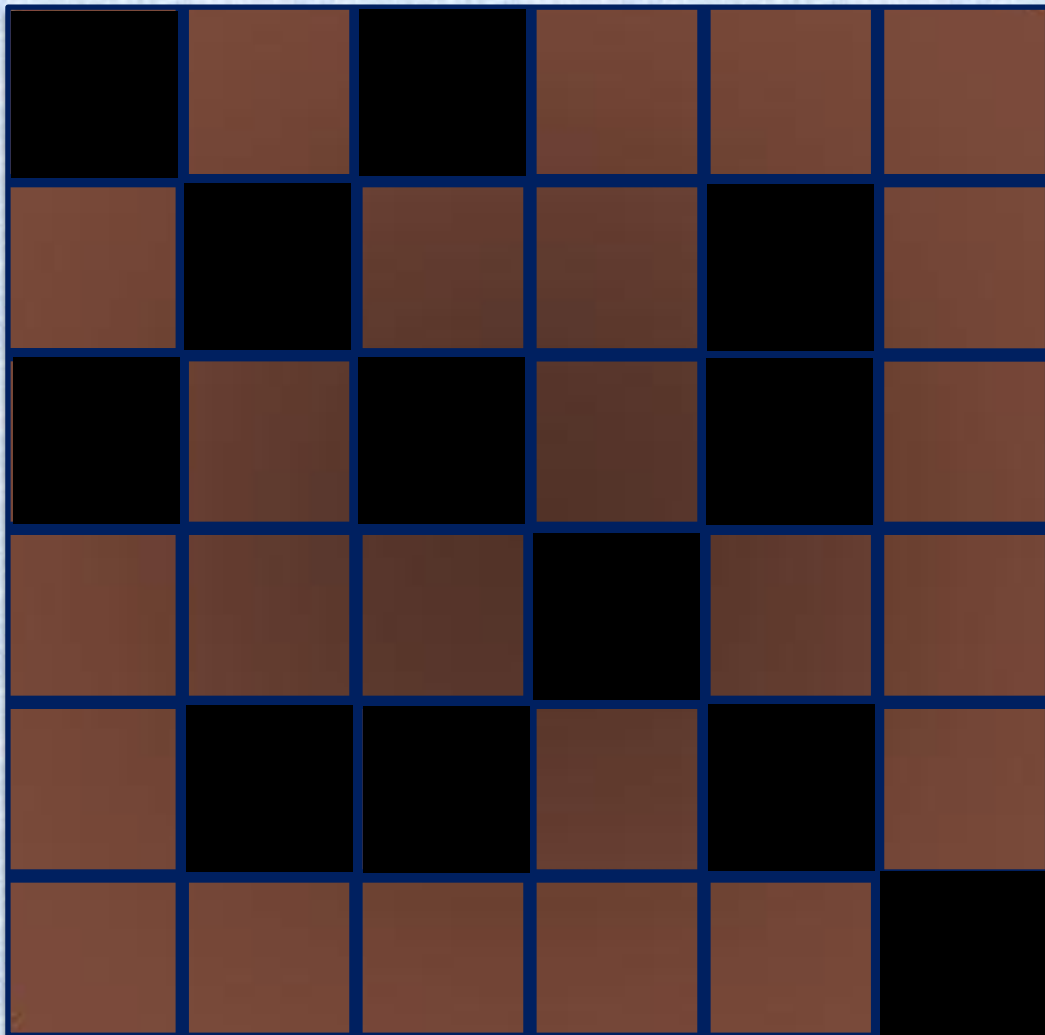


- Все потоки выполняют одинаковые инструкции
- Потоки группируются в блоки
- У каждого блока есть быстрая память общая для всех потоков блока

УМНОЖЕНИЕ МАТРИЦЫ НА ВЕКТОР

64

64



N

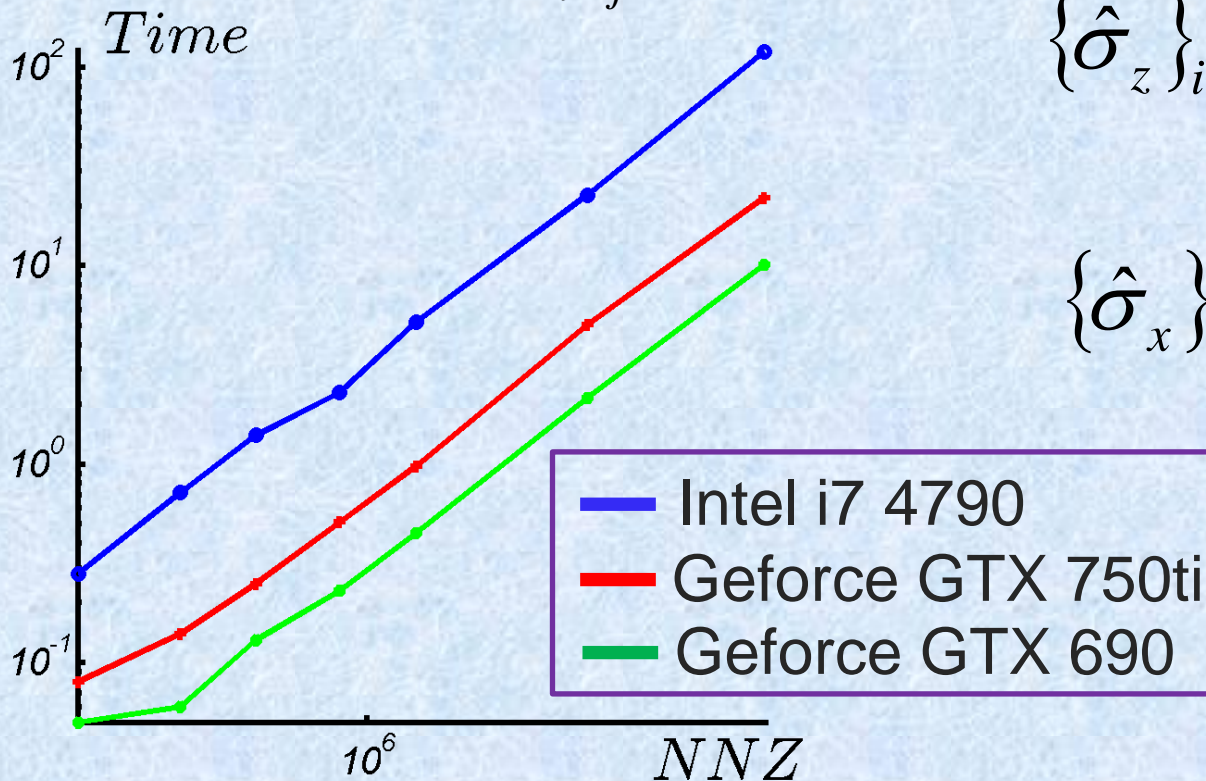
ТЕСТ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ

Модельный гамильтониан

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N v_i \{\hat{\sigma}_z\}_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{2} \chi_{ij} \{\hat{\sigma}_x\}_i \cdot \{\hat{\sigma}_x\}_j$$

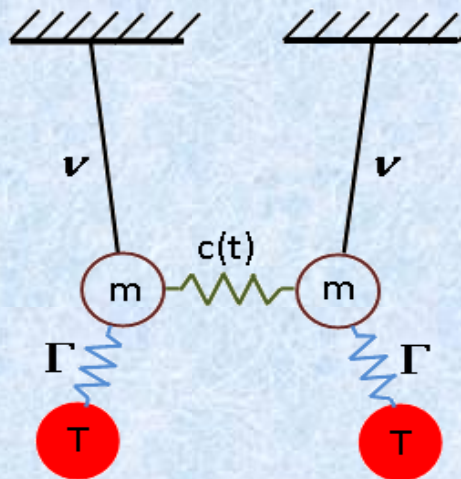
$$\{\hat{\sigma}_z\}_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\{\hat{\sigma}_x\}_i = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА

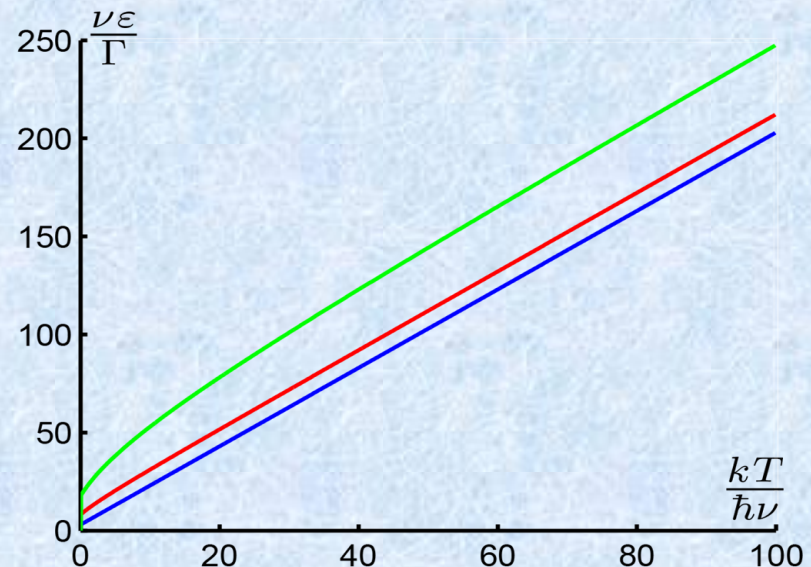
Нелинейная стадия параметрического распада



В системе двух параметрически связанных осцилляторах:

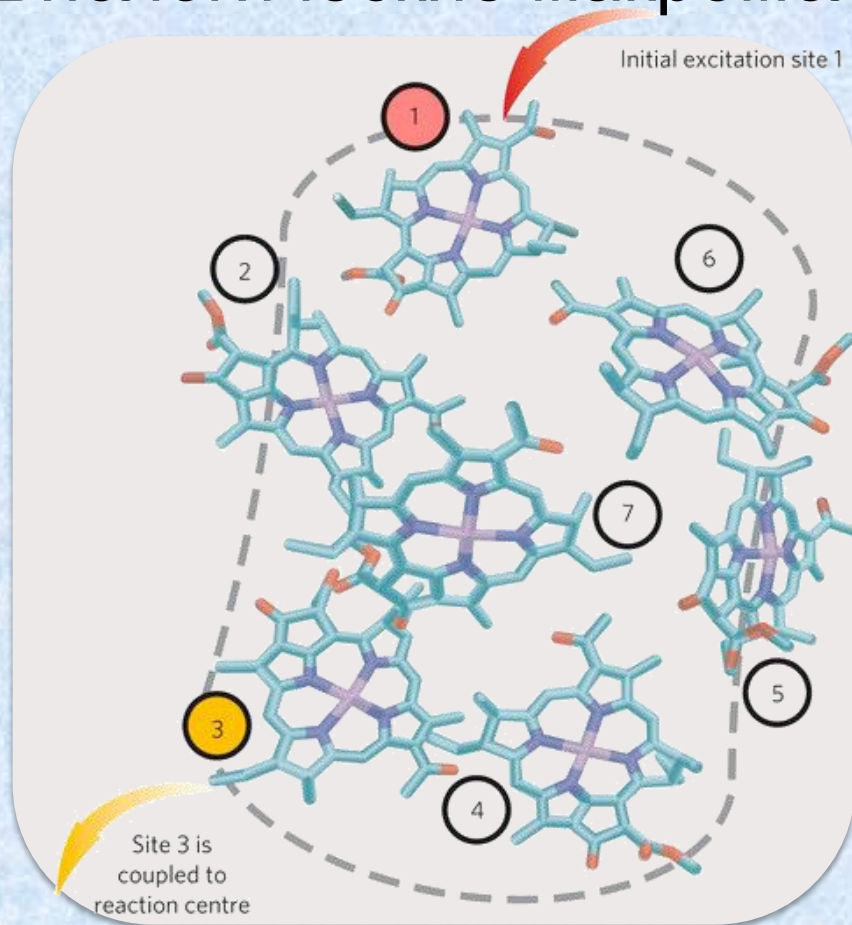
- Существуют запутанные состояния при больших температурах
- В этих состояниях происходит экспоненциальное накопление запасенной энергии

1. F. Galve, L. A. Pachon and D. Zueco, Bringing Entanglement to the High Temperature Limit, Phys. Rev. Lett., 2010, Vol. 105(18), 180501
2. T. F. Roque, J. A. Roversi, Role of Instabilities in the Survival of Quantum Correlations, Phys. Rev. A, 88, 032114, 2013
3. R. Schmidt, J. T. Stockburger, J. Ankerhold, Almost Local Generation of Einstein-Podolsky-Rosen Entanglement in Nonequilibrium Open Systems, Phys. Rev. A, 88, 052321, 2013
4. V.O. Martynov, V.A. Mironov, L.A. Smirnov Relaxation in the system of two coupled quantum parametric oscillators. Proceedings FNP 2013



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА

Биологические макромолекулы

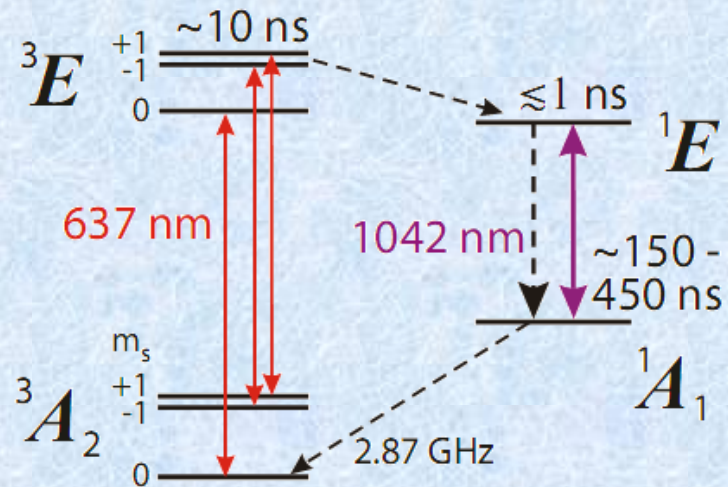


При моделировании макромолекулы можно представить в виде набора слабосвязанных частей, в каждой из которых существует экситонное возбуждение плюс колебания атомного остова

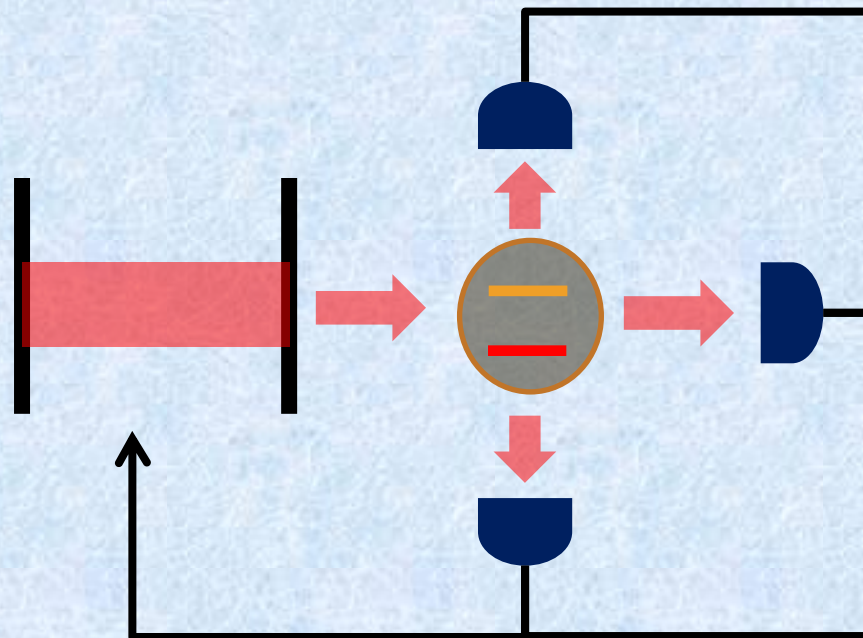
N. Lambert et al., 2012.
Quantum biology

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА

Система NV-
центров в алмазе



Системы с
обратной связью



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дальнейшее развитие комплекса:

1. Уменьшение доли кода исполняемого на CPU
2. Зависимость гамильтониана от классических стохастических функций
3. Немарковские резервуары
4. Улучшение интерфейса