

Оптимизация метода волновой функции Монте-Карло в задаче поиска аттрактора стационарной квантовой системы

С. Денисов^{1,2}, В.Д. Волокитин¹, А.В. Линев¹, М.В. Иванченко¹, И.Б. Мееров¹

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского¹,
Университет Аугсбурга²

В работе представлены результаты решения задачи поиска асимптотической матрицы плотности открытой квантовой системы с N состояниями, также называемой «аттрактором системы». Динамика модельной системы описывается уравнением Линдблада. Поиск аттрактора системы требует нахождения нулевого вектора сложного неэрмитового оператора (тензора 4-го порядка) размера $N \times N \times N \times N$, что определяет значительную вычислительную трудоемкость задачи. В литературе показано, что уже при сравнительно небольших значениях N численное нахождение аттрактора требует использования суперкомпьютеров.

Прямой метод вычисления асимптотической матрицы плотности требует решения СЛАУ с N^2 переменными. В литературе приводятся результаты моделирования прямым методом для $N=20$ состояний. Прямой метод потенциально позволяет найти аттрактор системы максимум с $N = 200$ состояниями. При больших размерностях исследователи сталкиваются с численной неустойчивостью. Одной из альтернатив является метод волновой функции Монте-Карло (Monte Carlo wave function) [1]. Данный метод был разработан К. Mølmer, Y. Castin, J. Dalibard в 1993 и независимо Н. Carmichael. Идея метода заключается в усреднении по многим реализациям результатов интегрирования во времени волновой функции с помощью неэрмитовых гамильтонианов специального вида. В отличие от прямого метода, данный метод может быть использован для исследования систем большой размерности, поскольку требует операций не с тензорами, а с матрицами размером $N \times N$. Однако данный метод никогда не был использован как практический инструмент вычисления асимптотической матрицы плотности открытой системы. Основной сложностью данного метода, является нахождение значения времени, в который происходит «квантовый скачок».

В докладе предлагаются ускоряющие модификации метода, позволяющие значительно сократить время решения задачи, а также новые алгоритмы максимально точного интегрирования во времени систем с неэрмитовыми гамильтонианами и нахождение времен «квантовых скачков». Основной идеей модификаций метода является использование экспоненциальных операторов [2] для численного интегрирования системы. Важное достоинство метода волновой функции заключается в значительных ресурсах внутреннего параллелизма, что делает его идеальным кандидатом для использования суперкомпьютеров. В ходе проведения вычислительных экспериментов на СК «Лобачевский» и СК «Ломоносов» наблюдалась масштабируемость, близкая к линейной. Приводятся результаты моделирования для систем размерности $\sim 10^3$.

Литература

1. K.Molme, Y.Castin, J.Dalibard. Monte Carlo wave-function method in quantum optics // Journal of the Optical Society of America B, March 1993.P. 524-538.
2. N.J.Higham. Functions of Matrices: Theory and Computation. U.S., Society for Industrial & Applied Mathematics, 2008.