



Nyílt kvantumrendszerek Monte-Carlo szimulációja

SLURM-VEZÉRELT VIRTUÁLIS KLASZTEREN

Vukics András, Wigner FK, Kvantumoptika csoport
ELKH Cloud tájékoztató rendezvény, 2021. október 28.

Mi a kvantumoptika?

- Fény-anyag kölcsönhatás elemi szinten (fotonok és atomok)
- Az emberiség által létrehozott legjobban kontrollálható rendszerek
 - kvantummetrológia
 - kvantumtechnológia
- Wigner Kvantumoptika csoport: elmélet, számítás, kísérlet
- Inherensen nyílt rendszerek
 - a (sok szabadsági fokú) környezettel való kölcsönhatás lényegesen befolyásolja a dinamikát
 - akár az elektromágneses mező vákuumállapota is viselkedhet „környezetként”!
 - Lamb-féle eltolódás, spontán emisszió

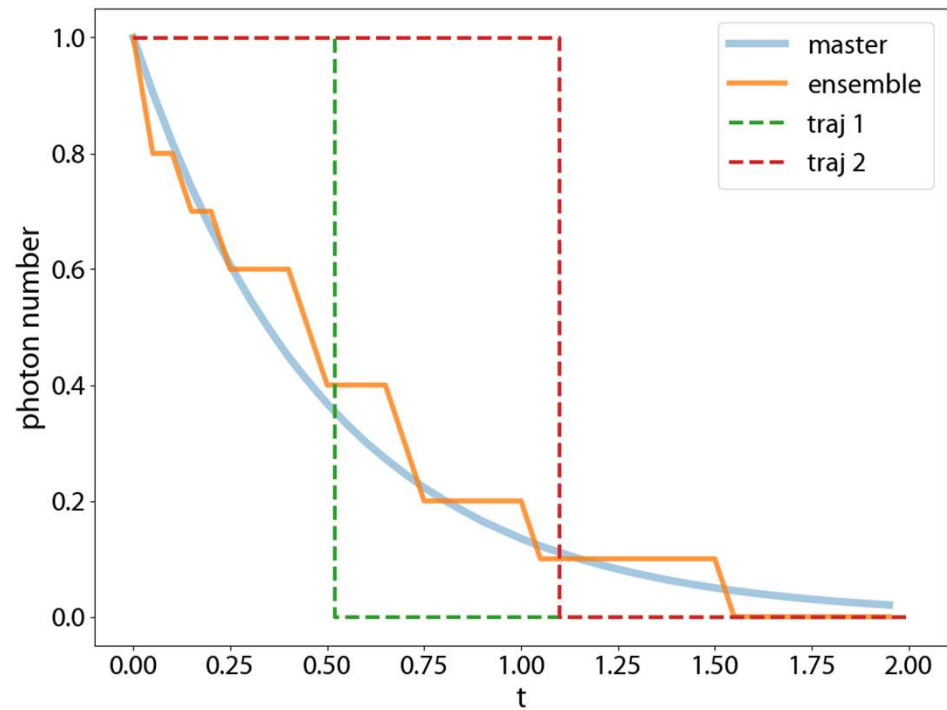
Nyílt kvantumrendszerek leírása

- Born–Markov-i master-egyenlet
 - sokaságra vonatkozik – statisztikus átlagot ír le
 - DIM^2 dimenziószámú a numerikus probléma
 - folytonos időfejlődést mutat
- Kvantumtrajektória módszerek, pl. kvantumugrás Monte-Carlo
 - egyedi kvantumrendszereket ír le
 - DIM dimenziószámú a numerikus probléma
 - időfejlődésnek van sztochasztikus része
 - nem-Hermitikus időfejlődés
 - kvantumugrás
 - természetes módon párhuzamosítható (1 job = 1 seed)
 - tipikus HTC probléma

Néhány példa

Kezdőállapot: $|1\rangle$

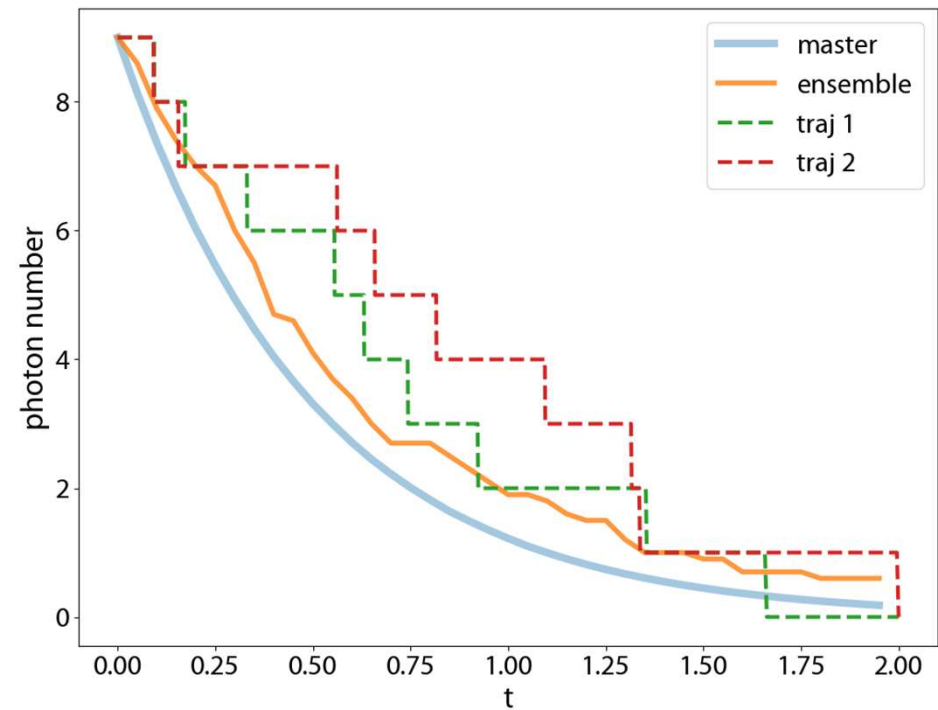
- Egyedi trajektóriák sztochasztikusak
- Sokaságátlag konvergál a master-egyenlet megoldásához



Néhány példa

Kezdőállapot: $|9\rangle$

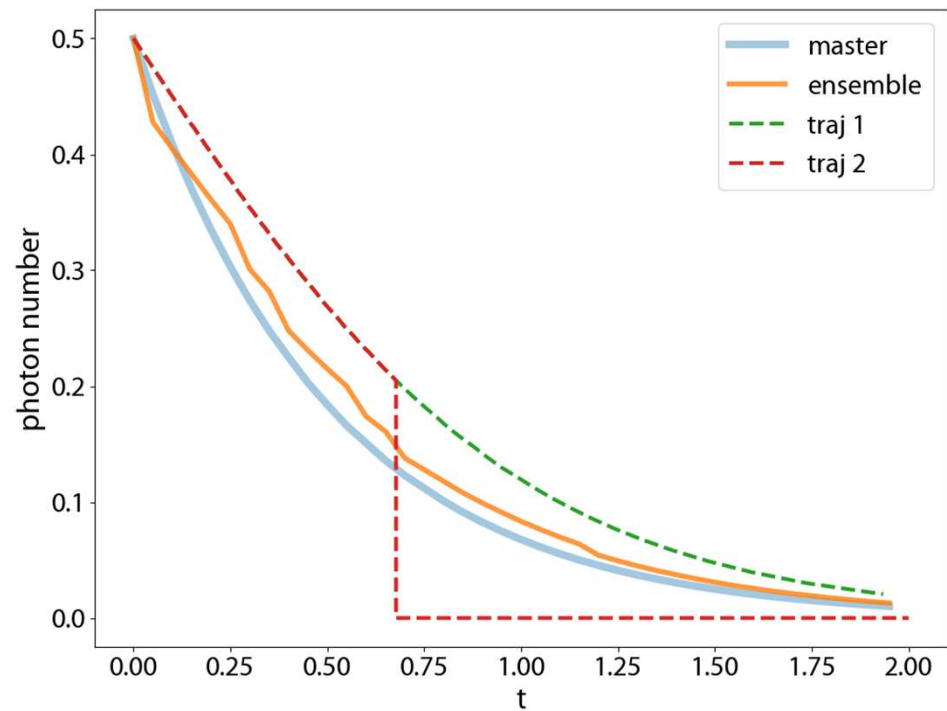
- Egyedi trajektóriák sztochasztikusak
- Sokaságátlag konvergál a master-egyenlet megoldásához



Néhány példa

Kezdőállapot: $|0\rangle + |1\rangle$
(Szuperpozíció, vö. Schrödinger-macska)

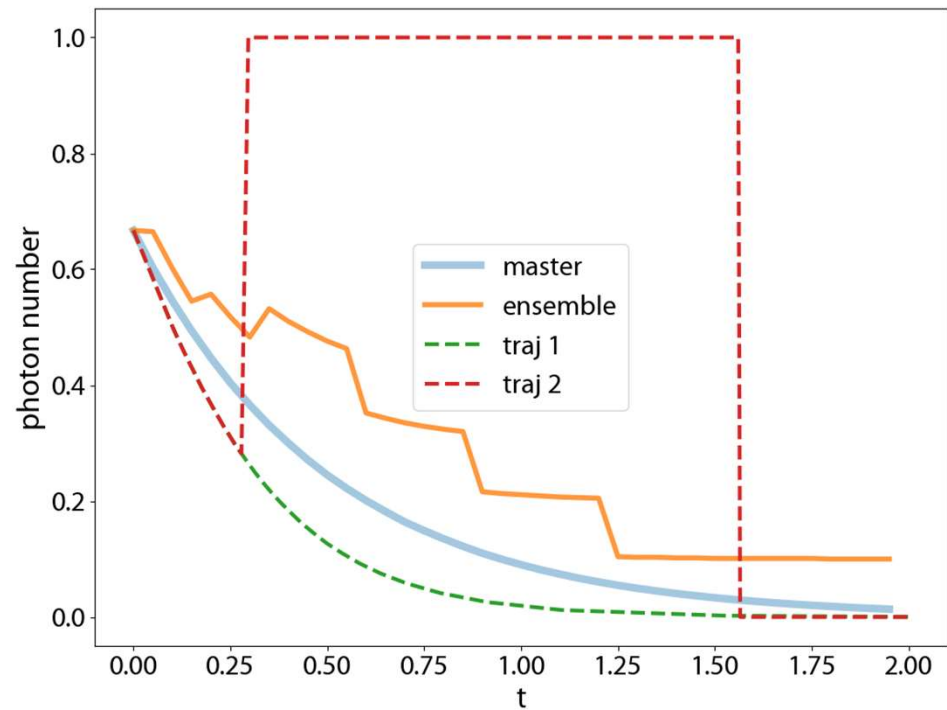
Nem-Hermitikus fejlődés megmutatkozik
 $\Rightarrow$ a trajektóriák fele nem bocsát ki fotont!



Néhány példa

Kezdőállapot: $|0\rangle + \varepsilon|2\rangle$

Fotonkiszökés növeli a fotonszámot a módusban!
⇒ energiamegmaradás csak sokaságátlagban teljesül

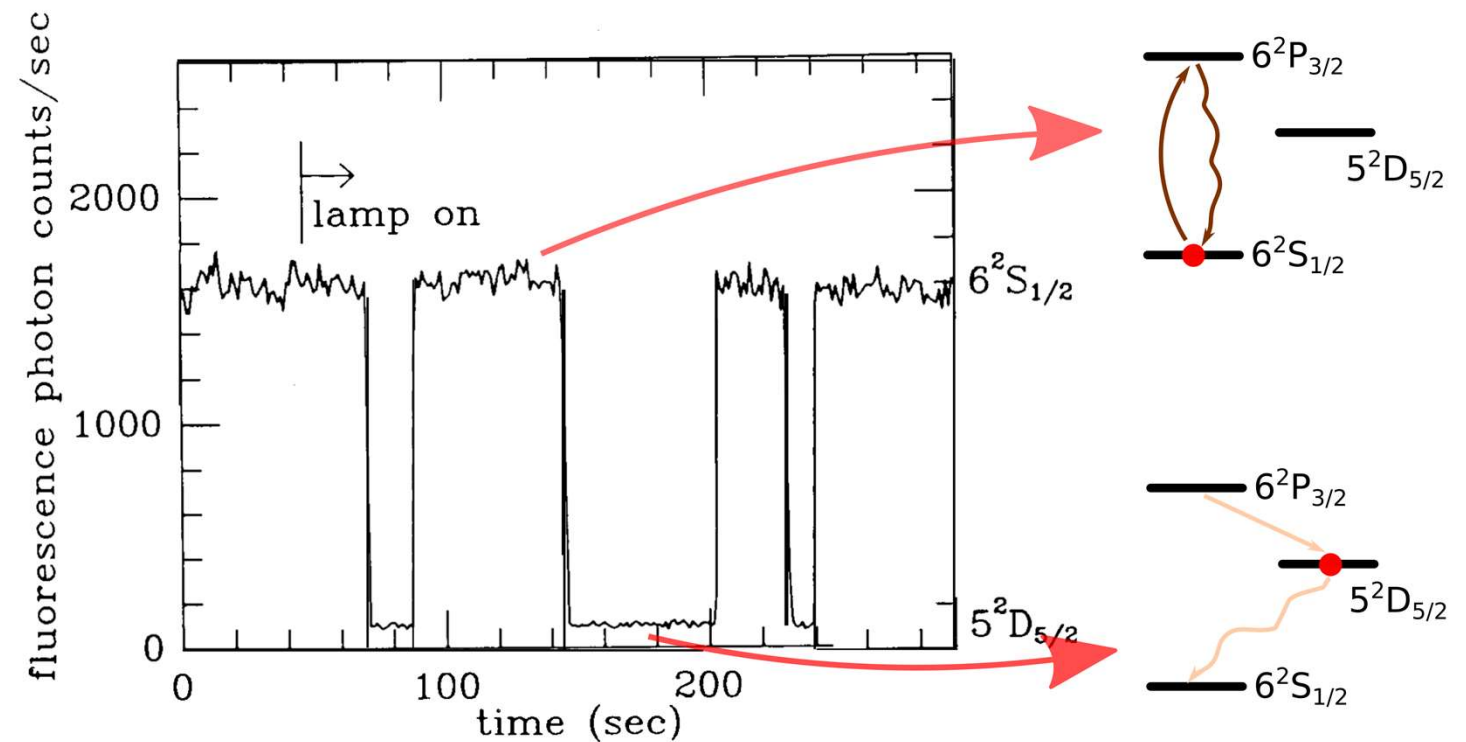


Kvantumugrások kísérleti megfigyelése

Hans Dehmelt
1986

Állapotdetektálás

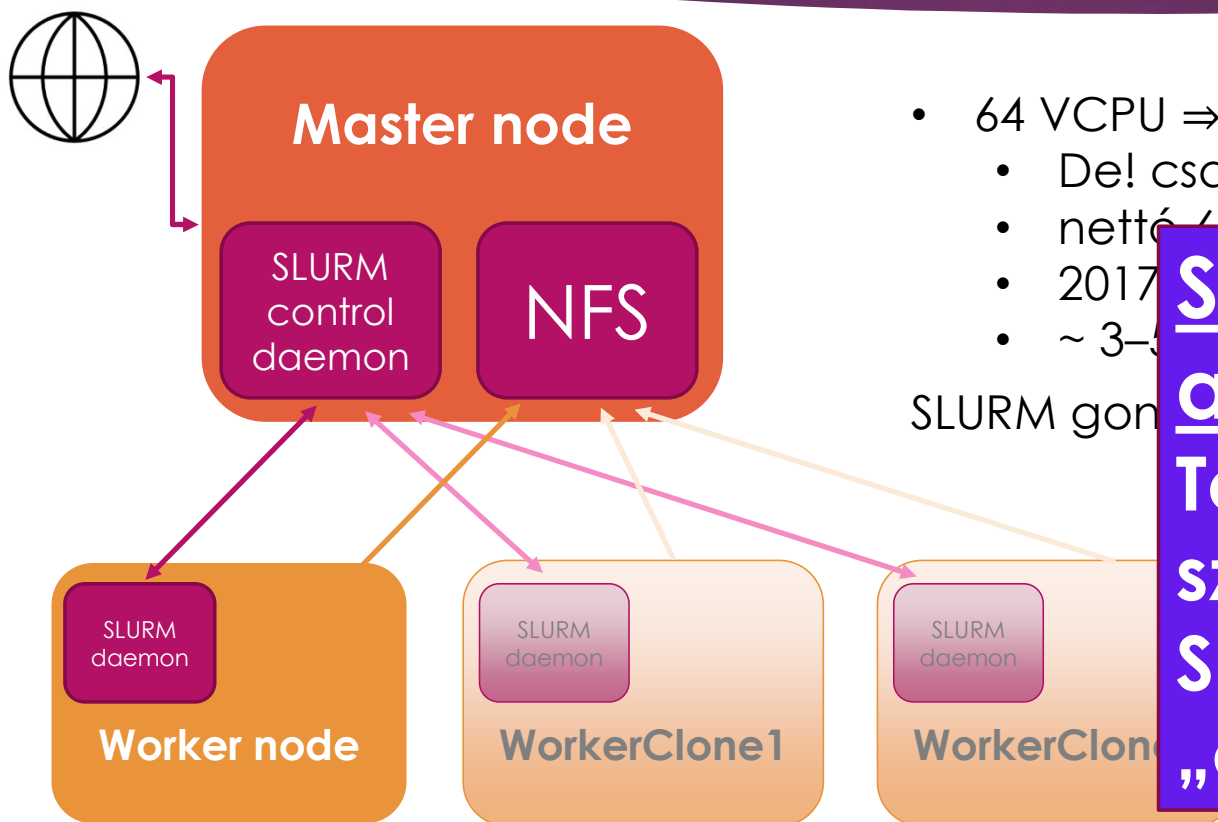
- atomórákban
- kvantumszámítógépekben



Implementáció: C++QED

- saját fejlesztésű szimulációs framework (2006–)
 - open-source projekt: <http://github.com/vukics/cppqed>
- alap design-ötlet: alapvető fizikai összetevőkből + kölcsönhatásokból tetszőlegesen összetett rendszerek építhetők fel
- nem használunk alkalmazáson belüli párhuzamosítást / GPU-t
 - ~3-5-szoros kapacitásnövekedéssel nem tudnánk új fizikát elérni
 - vö. dimenziószám exponenciális növekedése az összetevők számával

Számítási infrastruktúra: virtuális klaszter az ELKH cloud-ban



- 64 VCPU $\Rightarrow$ 8db 8 CPUs gép
 - De! csak 2 gépet kell karban tartani
 - nettó 64-szeres gyorsulás
 - 2017
 - ~ 3–4

SLURM gon

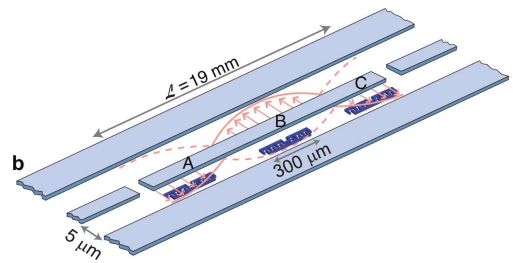
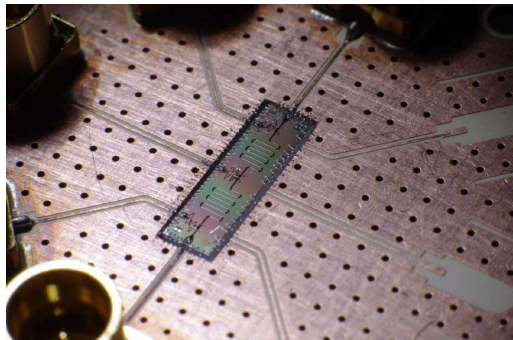
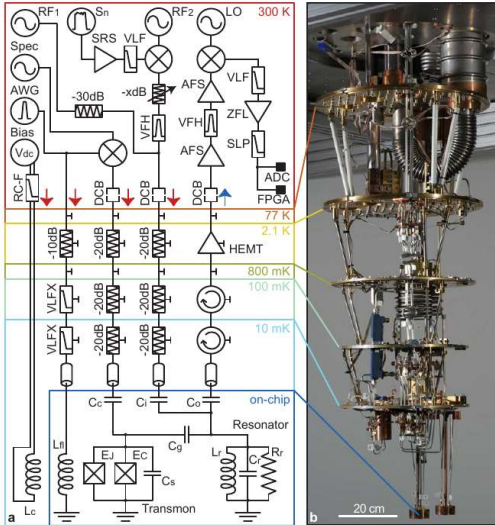
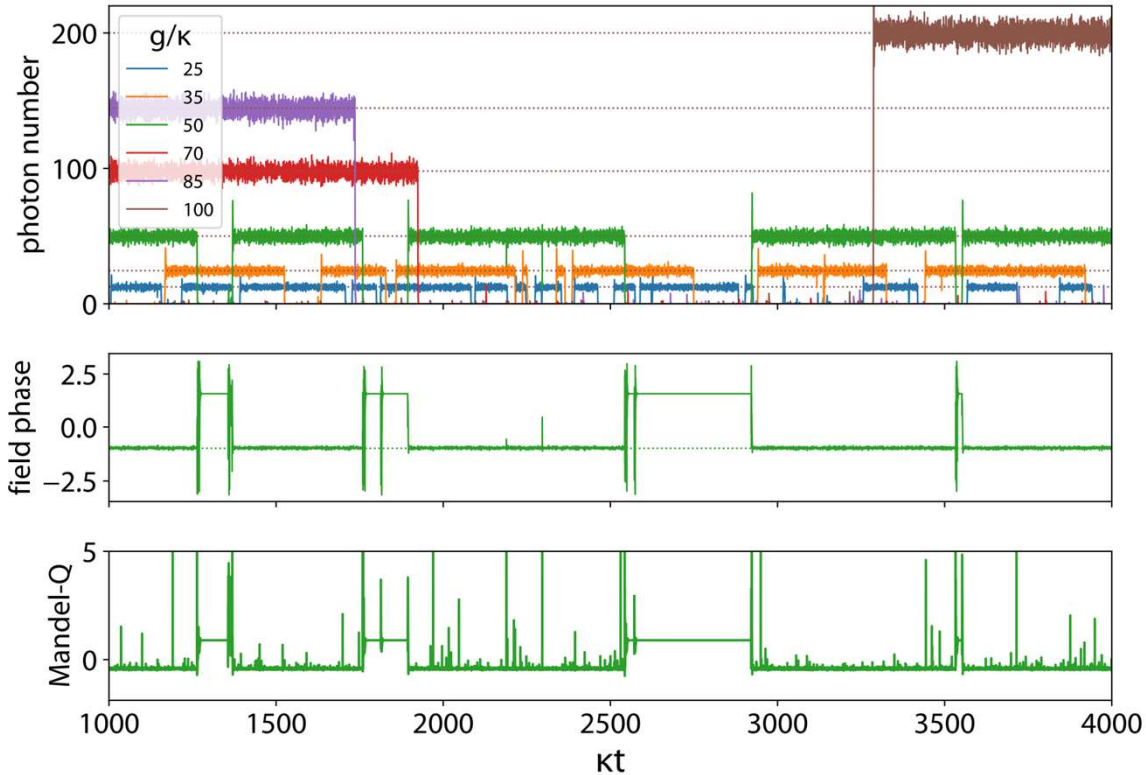
SLURM referencia architektúra révén:

Teljes klaszter tetszőleges
számú worker node-dal,
SLURM-mal és NFS-sel
„out-of-the-box”!

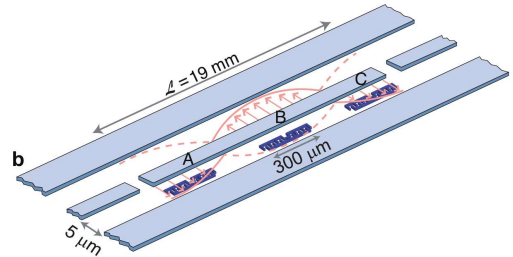
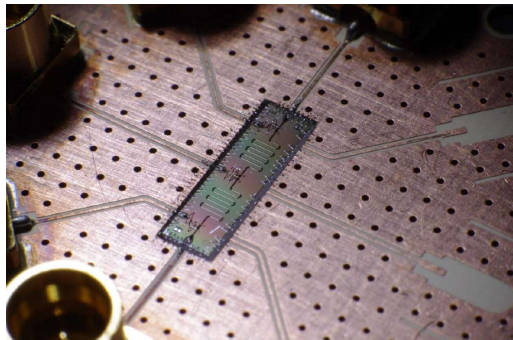
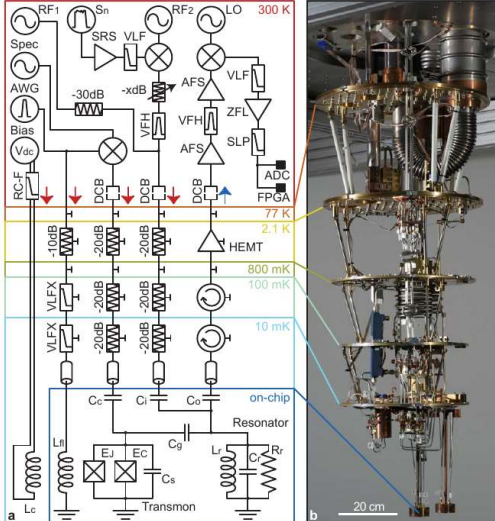
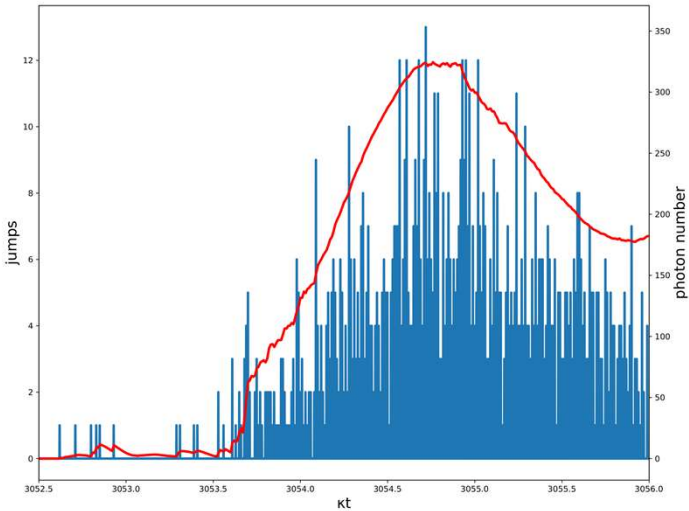
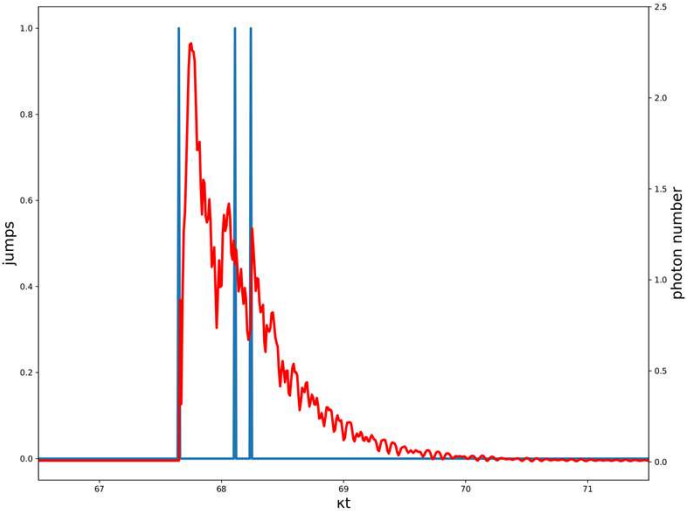
Virtuális klaszter előnyei

- Publikus HTC/HPC klaszterhez képest:
 - saját szoftverkörnyezet kialakításának lehetősége (nekünk: Ubuntu 20.04LTS)
- Saját HTC/HPC klaszterhez képest:
 - nincs „vas”, amit karban kellene tartani :)
- Tetszőleges számú, azonos konfigurációjú worker klón előállításának lehetősége
 - változó számú worker, a felhő kihasználtságának függvényében

Egy példa a praxisunkból: szupravezető kvantumáramkör szimulációja



Egy példa a praxisunkból: szupravezető kvantumáramkör szimulációja



Köszönöm a
figyelmet!

Köszönet

- a Wigner Adatközpont,
- a Wigner SZHK és
- a SZTAKI

munkatársainak, különösen

- Török Ferencnek és
- Mező Györgynek

a sok támogatásért és
segítségért!