

# Kvantumtrajektória szimulációk

SLURM-VEZÉRELT VIRTUÁLIS KLASZTEREN

Vukics András, Wigner FK, Kvantumoptika csoport  
ELKH Cloud tájékoztató rendezvény, 2022. november 24.

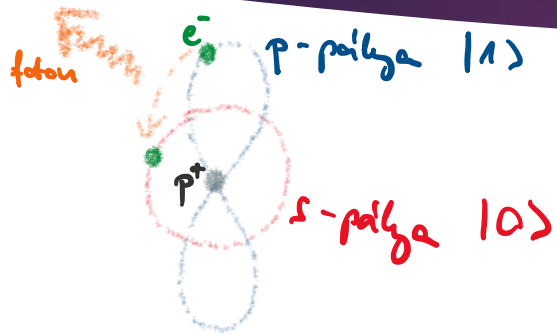
# Mi a kvantumoptika?

- 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

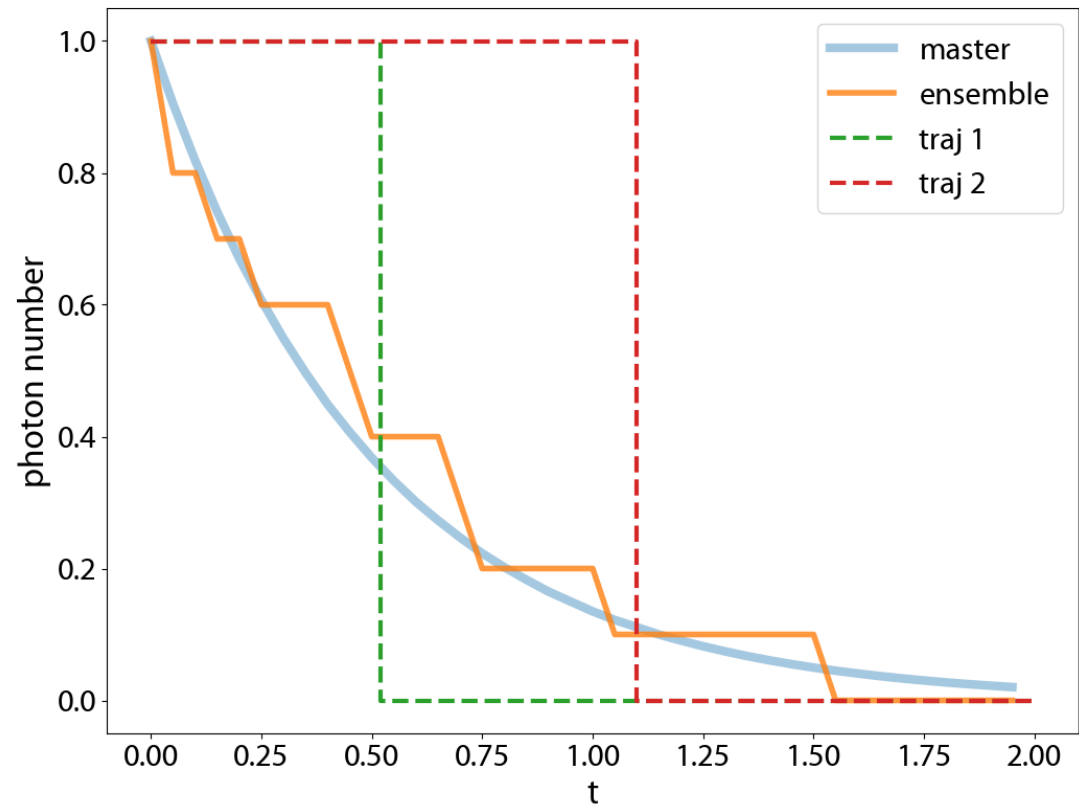
- Born–Markov-i master-egyenlet
  - sokaságra vonatkozik – statisztikus átlagot ír le
  - $\text{DIM}^2$  dimenziószámú a numerikus probléma
  - folytonos időfejlődést mutat
  - HPC problémaként implementálható (nagy mátrixműveletek)
- Kvantumtrajektória módszerek, pl. kvantumugrás Monte-Carlo
  - egyedi kvantumrendszereket ír le
  - DIM dimenziószámú a numerikus probléma
  - időfejlődésnek van sztochasztikus része
    - nem-Hermitikus időfejlődés
    - kvantumugrás
  - tipikus HTC probléma (1 job = 1 seed)

# Példa 1. – H-atom spontán emisszió

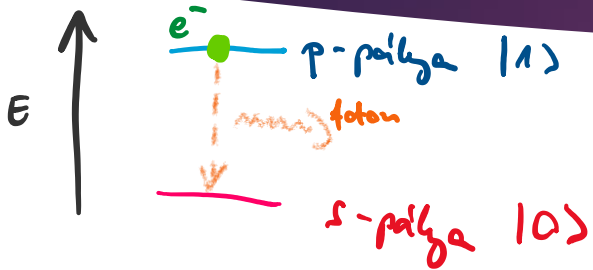


Kezdőállapot:  $|1\rangle$

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

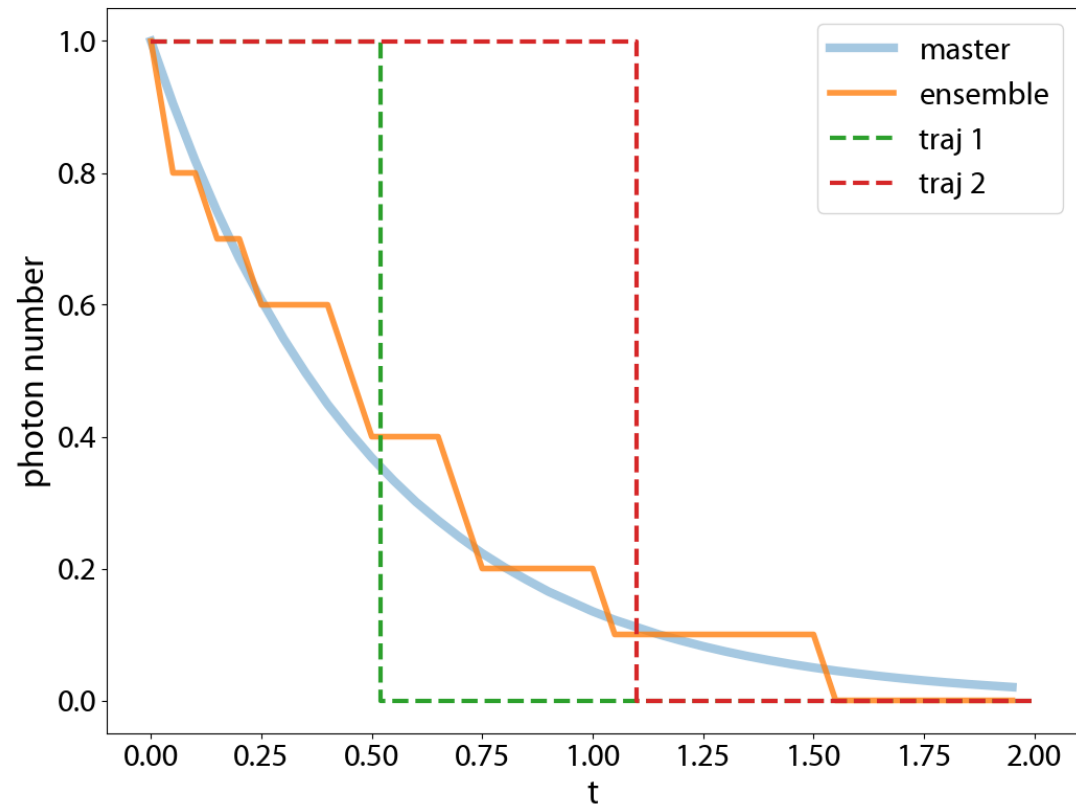


# Példa 1. – H-atom spontán emisszió

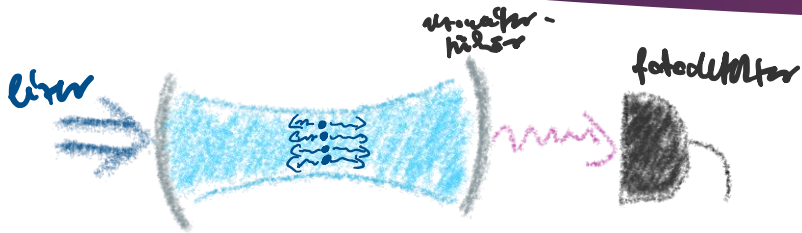


Kezdőállapot:  $|1\rangle$

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



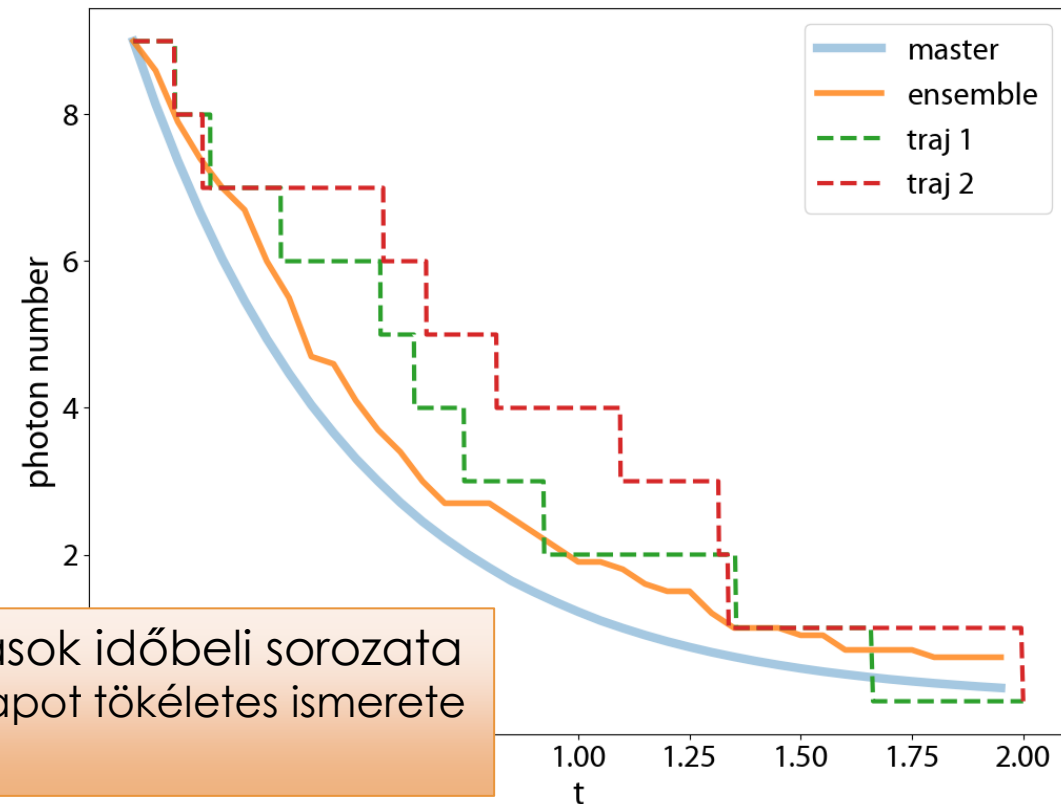
# Példa 2. – optikai rezonátor



Kezdőállapot:  $|9\rangle$

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

Kvantumtrajektória = kvantumugrások időbeli sorozata  
 Ennek tökéletes ismerete = kvantumállapot tökéletes ismerete  
 (idealizáció)

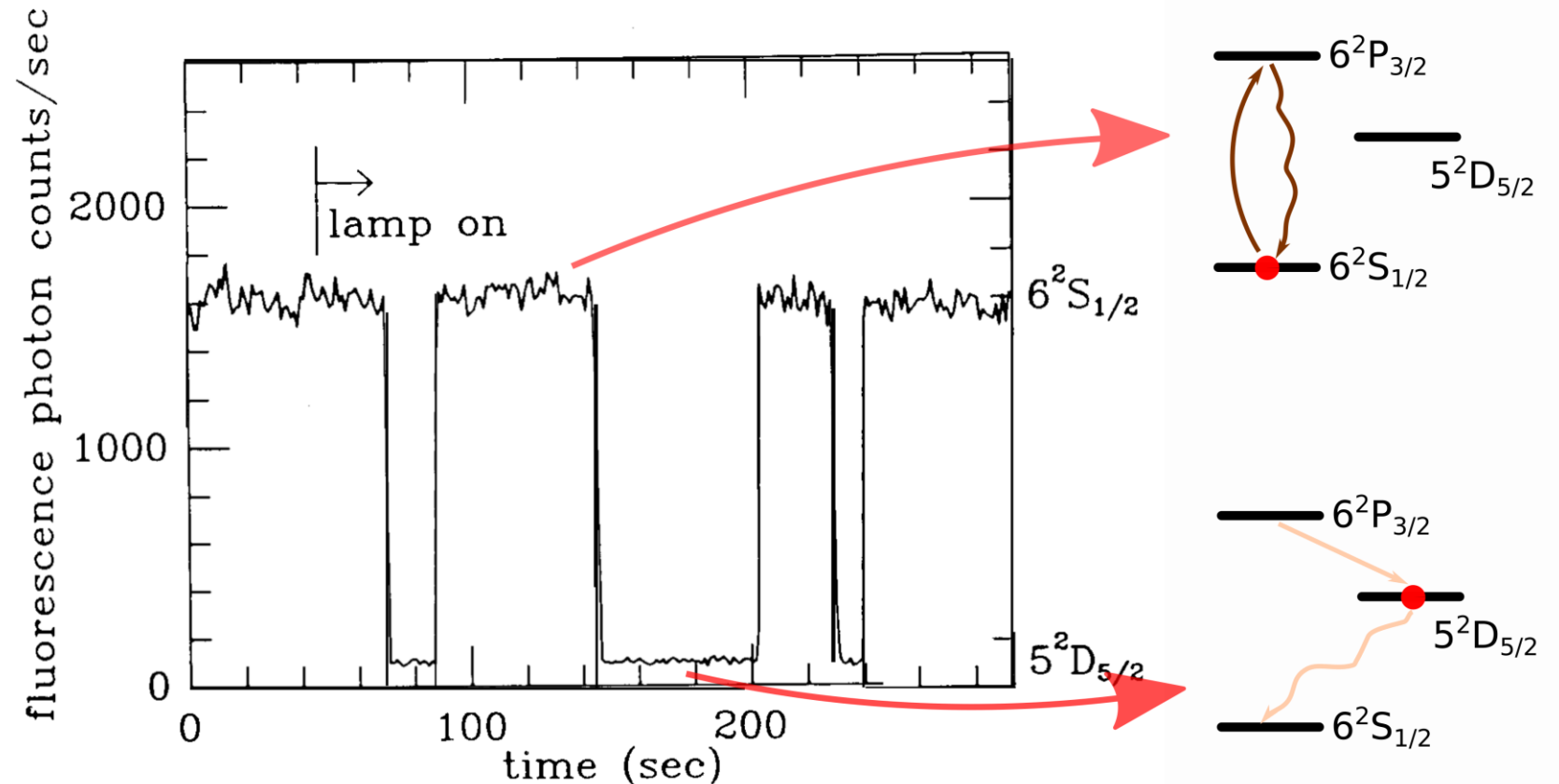


# Kvantumugrások kísérleti megfigyelése

Hans Dehmelt  
1986

Állapotdetektálás

- atomórákban
- kvantumszámítógépekben

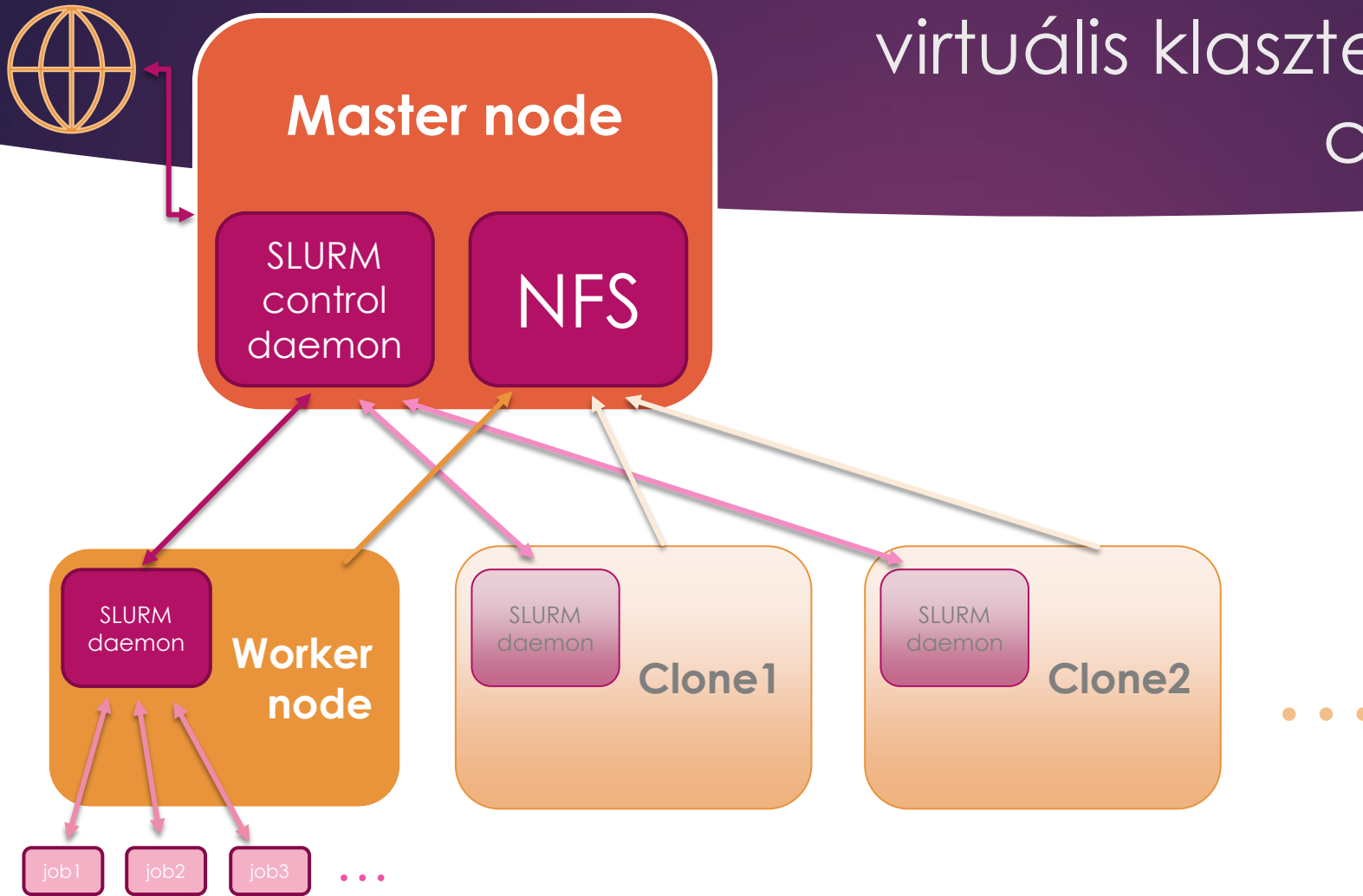


# Implementáció: C++QED

- saját fejlesztésű szimulációs framework (2006–)
  - nyílt forráskódú projekt: <https://github.com/vukics/cppqed>
- alap design-ötlet: alapvető fizikai összetevőkből + kölcsönhatásokból tetszőlegesen összetett rendszerek építhetők fel
- nem használunk alkalmazáson belüli párhuzamosítást / GPU-t
- változatos, nyílt forráskódú könyvtárakra támaszkodik

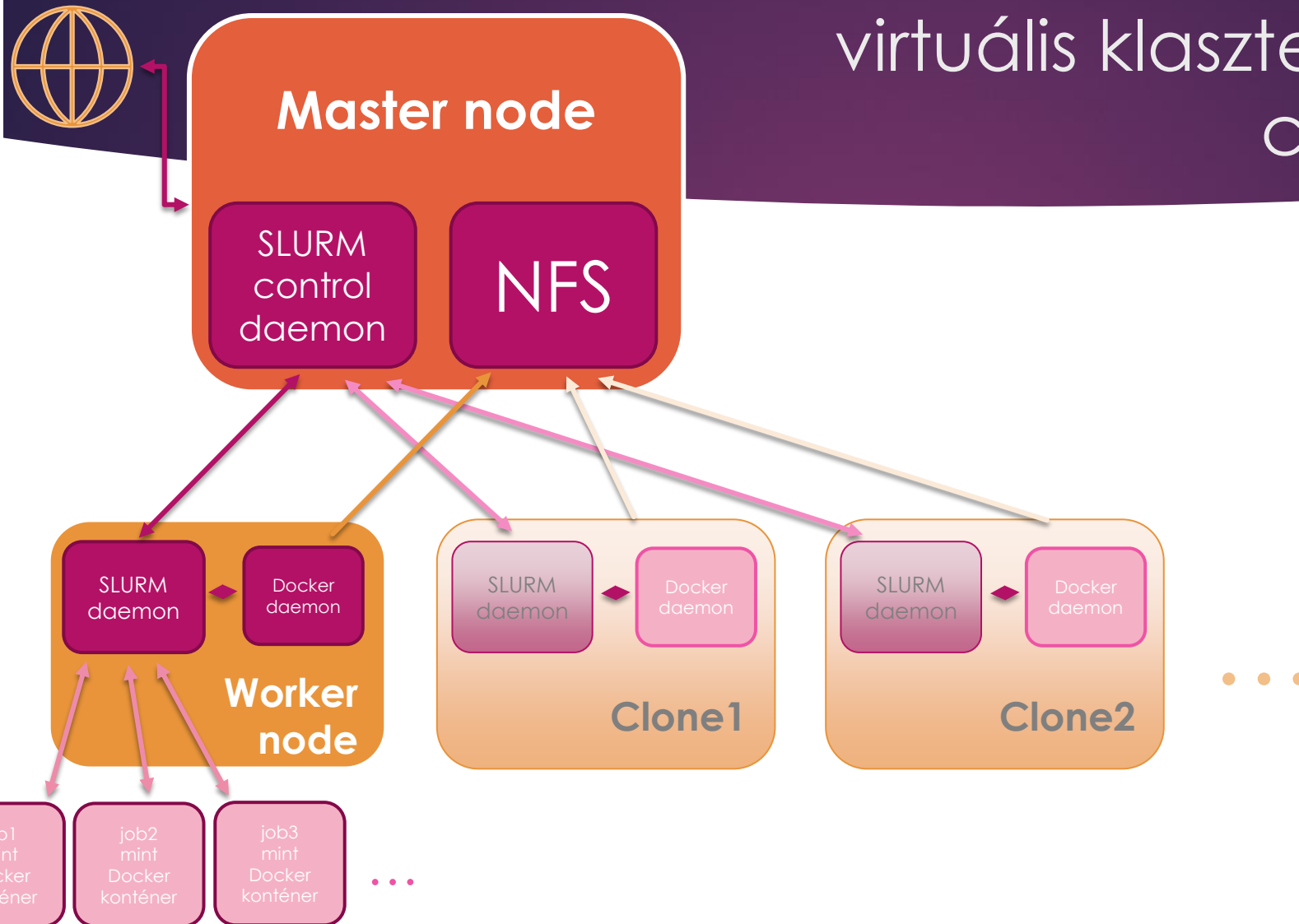


# Számítási infrastruktúra: virtuális klaszter az ELKH cloud-ban



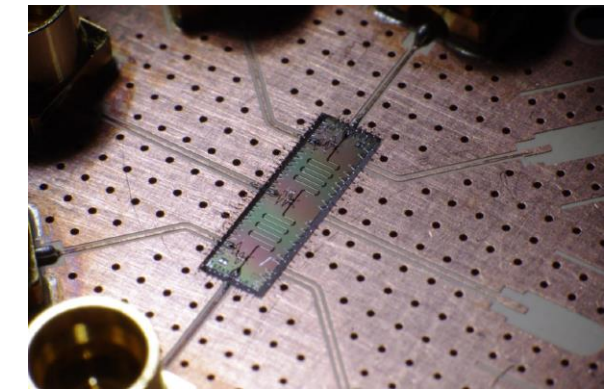
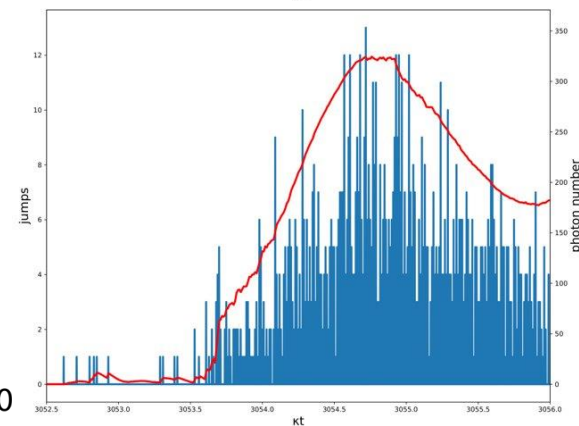
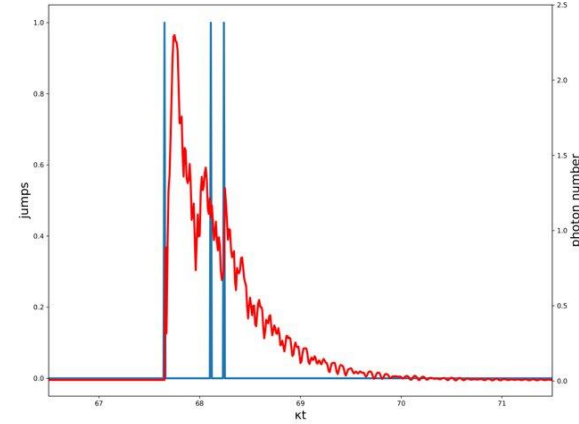
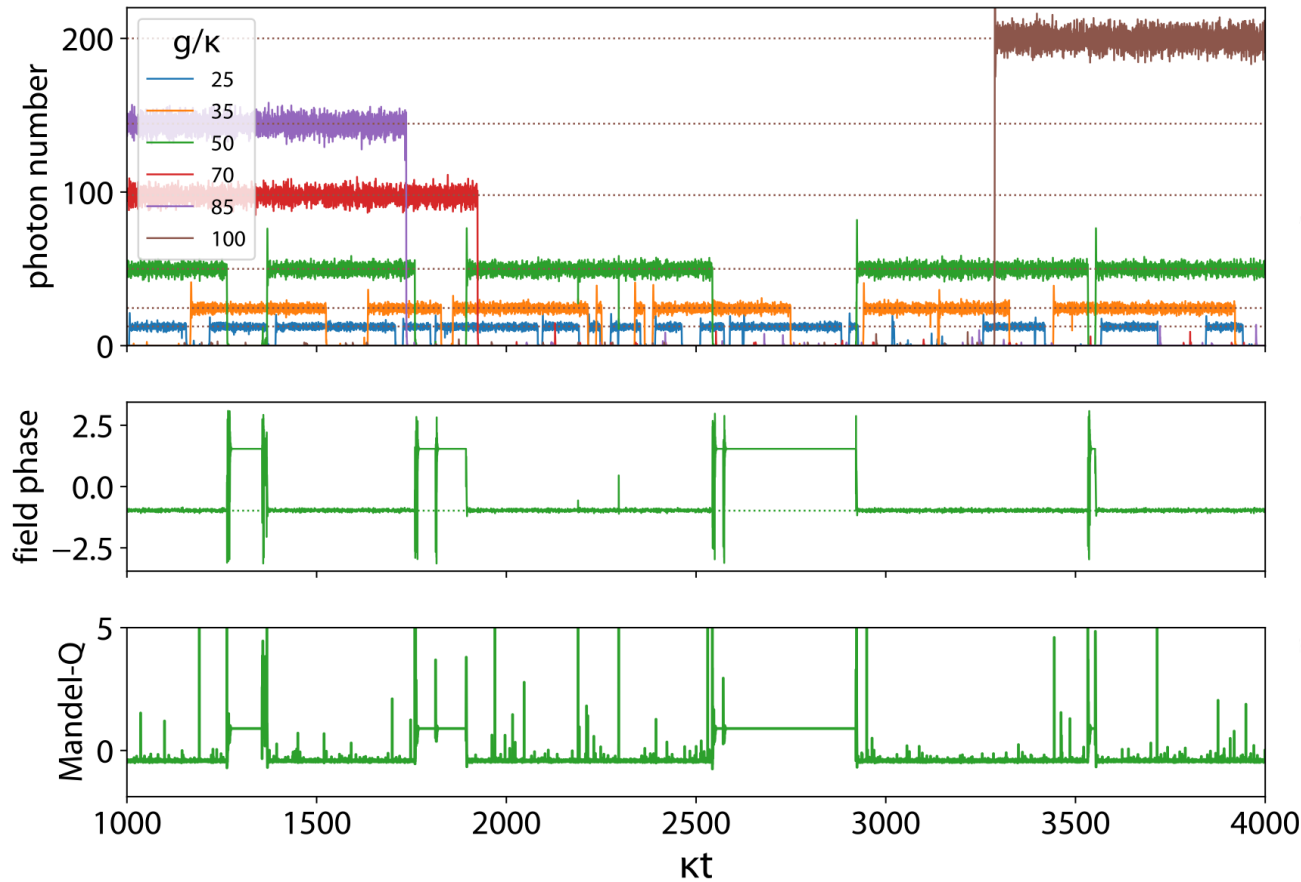
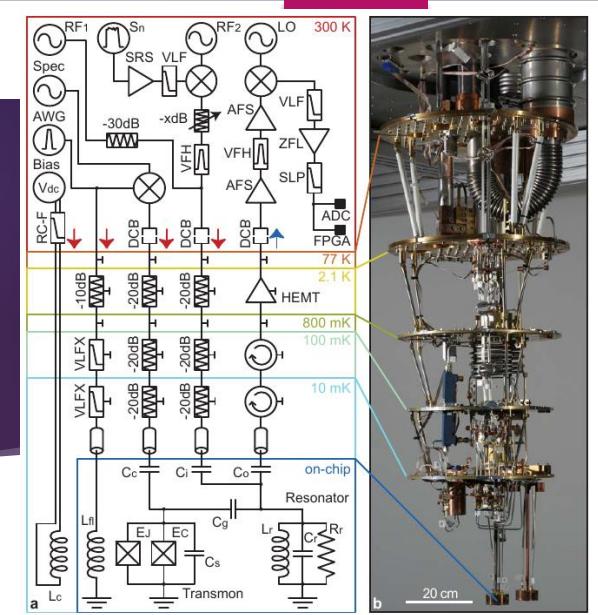
- 64 VCPU  $\Rightarrow$  8db 8 CPUs gép
  - De! csak 2 gépet kell karban tartani
  - nettó 64-szeres gyorsulás
  - 2017 óta
  - ~ 3–5 felhasználó
- SLURM gondoskodik az optimális kihasználtságról

# Számítási infrastruktúra: virtuális klaszter az ELKH cloud-ban



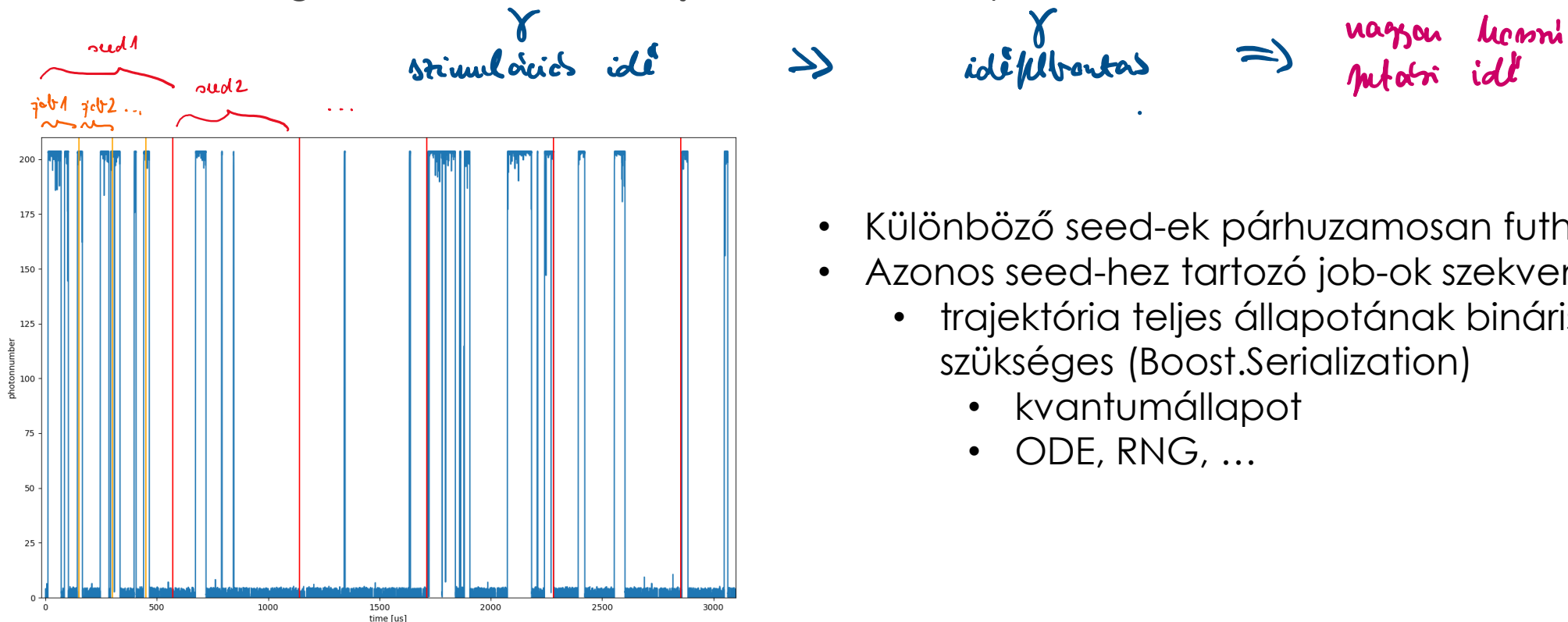
- 2021 óta:
  - Terraform-os orkesztráció
  - Docker réteg bevezetése  
=> worker-ek karbantartása triviálissá válik (nem szükséges komplex szoftverkörnyezet)

# Egy példa a praxisunkból: szupravezető kvantumáramkör szimulációja



# Implementáció a klaszteren

Nehézség: bistabilitás időskálája  $\gg$  mikroszkopikus időskálák



- Különböző seed-ek párhuzamosan futhatnak
- Azonos seed-hez tartozó job-ok szekvenciálisan
  - trajektória teljes állapotának bináris mentése szükséges (Boost.Serialization)
    - kvantumállapot
    - ODE, RNG, ...

# Implementáció a klaszteren

```
#!/bin/bash

if [ -z "$5" ]
then
  sdf=0 # echo "\$var is empty"
else
  sdf=$5 # echo "\$var is NOT empty"
fi

kappa=$1
eta=$2

cutoff=$(calc "int(3*$eta**2/$kappa**2)")

Dt=$(calc "display(5), 1/(5*$kappa)" | sed "s/~/g")

# echo "Dt for this run is" $Dt

gs="[-343.99928, -476.57143, -570.25645, -641.02102]"

Deltas="[0., 0., -418.42367, -1286.07232, -2642.61797]"

gammas="[0.,0.,0.,0.]"

gamma_parallel_vector="[0.,0.,0.,0.,0.]"

/usr/local/bin/CCQED5 --dc 0 --Dt $Dt --sdf $sdf --dpLimit 0\
.05 --cutoff $cutoff --kappa $kappa --gammas $gammas --gamma\
_parallel_vector $gamma_parallel_vector --gs $gs --eta $eta \
--deltas $Deltas --deltaC 0 --seed $3 --o $4.d --NDt 10000

-UU-:----F1 noPhi5.sh All L1 (Shell-script[bash]) -
```

```
#!/bin/bash

name="$1"_"$2"_"$3"_"$4

sbatch --dependency=singleton --job-name=$name -D$(pwd) "$1".sh $2 $3 $4 $name $5

-UU-:----F1 launch.sh All L1 (Shell-script[bash]) -----
```

job neve az összes releváns  
paraméter (+seed) tartalmazza

azonos neve job - a  
st/venialisom indoklata

Köszönöm a  
figyelmet!

## Köszönet

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

munkatársainak, különösen

- Török Ferencnek,
- Mező Györgynek és
- Emődi Márknak

a sok támogatásért és  
segítségért!