

А. И. Стрельцов, О. И. Стрельцова

Исследование сильнонеравновесных квантово-динамических процессов в бозонных системах с помощью пакета MCTDHB

В рамках сотрудничества между группой по теории многочастичных бозонных систем [1] Центра квантовой динамики Гейдельбергского университета (Германия) и Лабораторией информационных технологий ОИЯИ продолжены работы по теоретическому исследованию динамических свойств квантовых систем, реализованных на основе сверххолодных атомов и молекул, находящихся во внешних магнитооптических потенциалах (ловушках).

В современных экспериментах со сверххолодными атомами основной наблюдаемой величиной является плотность частиц, соответствующая многочастичной волновой функции, полностью описывающей исследуемую квантовую систему. Это преимущество физики сверххолодных частиц позволяет провести

прямое сравнение экспериментальных данных с теоретическими предсказаниями, полученными путем решения нестационарного многочастичного уравнения Шредингера, описывающего статические свойства этих систем, а также квантовую неравновесную динамику. Решение многочастичного нестационарного уравнения Шредингера, особенно в многомерном случае (двумерном и трехмерном), является ресурсоемкой вычислительной задачей, требующей разработки уникальных параллельных алгоритмов, существенно сокращающих время компьютерного моделирования.

Были продолжены работы по дальнейшей разработке и оптимизации пакета MCTDHB (Multiconfigurational Time-Dependent Hartree for Bosons) [1], реализующего одноименный метод MCTDHB [2,3] численного ре-

A. I. Streltsov, O. I. Streltsova

Investigation of Highly Non-Equilibrium Quantum Dynamics in Bosonic Systems with MCTDHB Package

In the framework of ongoing collaboration between Many-Body Theory of Bosons group [1] at the Centre for Quantum Dynamics, Heidelberg University, and the Laboratory of Information Technologies, JINR, we continue theoretical investigations of the highly non-equilibrium quantum dynamics implemented in trapped systems of ultra-cold atoms and molecules.

In modern experiments with trapped ultra-cold atomic clouds, the density of the many-particle quantum system is the main routinely detected observable. This unique advantage of the physics of ultra-cold atoms and molecules allows us to compare directly the experimentally detected

evolution of the quantum many-particle system with theoretical (numerical) solutions of the respective many-particle Schrödinger equation governing this dynamics. Numerical solution of this equation, especially in higher dimensions (2–3D) is known to be a difficult problem requiring considerable computational efforts and resources. To make these computations feasible, inventions and developments of novel efficient methods and algorithms are unavoidable tasks.

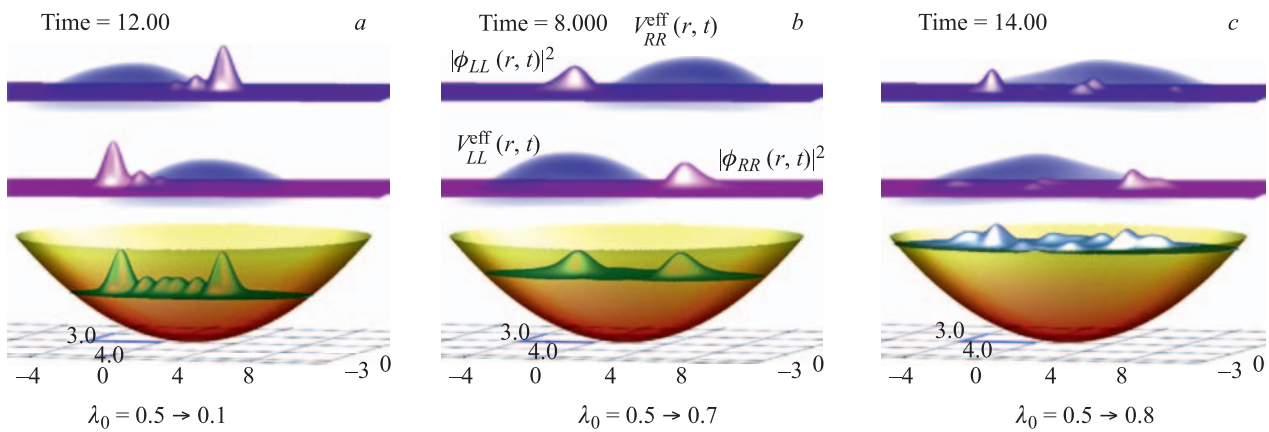
We continue to develop and optimize the Multiconfigurational Time-Dependent Hartree for Bosons (MCTDHB) package [1] designed to solve the many-body Schrödinger equation for bosons. We plan to utilize new-

шения многочастичного нестационарного уравнения Шредингера. Разработанные для пакета MCTDHB программные модули предназначены для проведения 1D, 2D, 3D расчетов на гибридных вычислительных системах, включающих в себя многоядерные CPU и графические ускорители. Параллельные модули реализованы на основе современных технологий параллельного программирования MPI+CUDA (MPI+PGI CUDA). Планируется включение разработанных модулей в новую версию пакета. Разработка, оптимизация и пред-

варительные расчеты проводились на гетерогенном вычислительном кластере HybriLIT (ЛИТ ОИЯИ) и гибридном кластере K100 (ИПМ им. М. В. Келдыша).

Разрабатываемый пакет MCTDHB позволяет исследовать бозонные системы в различных режимах динамически изменяемых внешних потенциалов $V(r, t)$ и потенциалов межчастичного взаимодействия бозонов. Сценарии таких режимов могут быть реализованы в современных экспериментах. Одним из таких исследований является изучение неравновесной динамики бо-

Визуализация концепции индуцированных зависимых от времени барьеров в двумерном случае. Эволюция фрагментированных бозонных систем, активированная резким смещением внешнего гармонического потенциала (ловушки) $V(x, y) \rightarrow V(x - 1, 5, y - 0, 5)$ с одновременным изменением параметра межчастичного взаимодействия: а) сильное уменьшение межчастичного отталкивания $\lambda_0 = 0, 5 \rightarrow 0, 1$, решение на временном слое $t = 12$; б) умеренное возрастание $\lambda_0 = 0, 5 \rightarrow 0, 7$ — решение на временном слое $t = 8$; в) сильное возрастание $\lambda_0 = 0, 5 \rightarrow 0, 8$ при $t = 14$



Visualization of the concept of interaction-induced time-dependent barriers to interpret the two generic dynamical regimes of strongly interacting trapped bosons; a 2D case. Evolutions of a two-fold fragmented initial state induced by a sudden displacement of the harmonic trap $V(x, y) \rightarrow V(x - 1.5, y - 0.5)$ with a simultaneous quench of the interparticle repulsion: a) strong decrease $\lambda_0 = 0.5 \rightarrow 0.1$, snapshot at $t = 12$; b) moderate increase $\lambda_0 = 0.5 \rightarrow 0.7$, snapshot at $t = 8$; c) stronger increase $\lambda_0 = 0.5 \rightarrow 0.8$, snapshot at $t = 14$

est parallel technologies available within the graphical accelerators GPUs+CUDA as well as within modern co-processors, e.g., Intel Xeon Phi, and adapt and integrate them into the sophisticated numerical methods and algorithms used in the existing MCTDHB package [2, 3]. Some preliminary developments, implementations and computations have already been performed on the HybriLIT (LIT, JINR) and on hybrid K100 clusters (the Keldysh Institute for Applied Mathematics, RAS).

The MCTDHB package has been developed for investigations of quantum dynamics in trapped ultra-cold bosonic systems, e.g., induced by quenching the interparticle interaction and external trap potentials. These scenarios are realistic and can be realized in modern experiments. As an example, in the figure we depict results of computation done for trapped 2D bosonic system with strong finite-range repulsive interparticle interactions. The non-equilib-

rium dynamics has been activated by a sudden displacement of the trap origin accompanied by a sudden quench of the repulsion. The strength of the interparticle repulsion is controlled by λ_0 . The one-particle density and trap potential are depicted in the lower parts of the figures. The upper parts show the density $|\phi_{kk}(r, t)|^2$ of the left (right) fragment and the time-dependent barriers $V_{ii}^{eff}(r, t)$ induced by the complimentary right (left) fragment. Depending on the quench of the repulsion, two different dynamical regimes of the evolution can be observed — non-violent under-a-barrier evolution, conserving the form and structure of the fragments (b), and an explosive over-a-barrier dynamics, leading to drastic changes of the density (a, c).

The results obtained within the ongoing collaboration have been reported by A. I. Streltsov on 8 July 2014 at a LIT seminar and published as a Rapid Communication in “Phys. Rev. Journal” [4].

зонной системы, индуцированной резким изменением внешнего потенциала (магнитооптической ловушки), например, его резким смещением, сопровождающимся мгновенным изменением силы межчастичного взаимодействия, характеризуемого параметром λ_0 . На рисунке представлен пример проведенного моделирования в двумерном случае для системы с основным состоянием в виде двух фрагментов, сформированным сильным межчастичным взаимодействием. Плотность частиц и форма внешнего потенциала представлены в нижней части рисунков, в верхней части показаны плотности $|\phi_{kk}(r, t)|^2$ левого (правого) фрагментов и формы зависящих от времени эффективных барьеров $V_{ii}^{\text{eff}}(r, t)$, индуцируемых соответственно правым (левым) фрагментами. В зависимости от режима изменения параметра λ_0 можно наблюдать два совершенно разных динамических режима эволюции — медленную динамику, сохраняющую форму фрагментов (*б*), или быстрый надбарьерный переход, приводящий к «взрывообразной» неравновесной динамике (*а, в*).

Результаты проведенных совместных исследований были представлены А.И. Стрельцовым на семинаре ЛИТ 8 июля 2014 г. и опубликованы в совместной работе [4].

Список литературы / References

1. Project “Multiconfigurational Time-Dependent Hartree for Bosons”. <http://mctdhub.org>
2. Streltsov A. I., Alon O. E., Cederbaum L. S. // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. P. 030402.
3. Alon O. E., Streltsov A. I., Cederbaum L. S. // Phys. Rev. A. 2008. V. 77. P. 033613.
4. Streltsova O. I., Alon O. E., Cederbaum L. S., Streltsov A. I. // Phys. Rev. A. 2014. V. 89. P. 061602(R).

25–26 сентября состоялась 116-я сессия Ученого совета ОИЯИ под председательством директора Института В. А. Матвеева и профессора Института ядерной физики им. Г.Неводничанского и Центра онкологии М. Валигурского (Краков, Польша).

Ученый совет почтил память выдающегося физика-теоретика, научного руководителя ОИЯИ академика РАН Владимира Георгиевича Кадышевского. Как директор ОИЯИ в 1992–2005 гг., он внес выдающийся вклад в успешное функционирование и дальнейшее развитие Объединенного института ядерных исследований на основе широкого международного сотрудничества. В. Г. Кадышевский был истинным сторонником фундаментальной науки, верил в ее огромную роль в сближении народов. Именно благодаря его усилиям Ученый совет ОИЯИ стал по-настоящему международным, состоящим не только из представителей государств-членов ОИЯИ, но и ученых из ведущих научных центров других стран, сотрудничающих с ОИЯИ. Его исключительная преданность науке, внимательное и доброе отношение к людям навсегда сохранятся в памяти коллег.

В. А. Матвеев проинформировал участников сессии о ходе выполнения рекомендаций 115-й сессии Ученого совета и решений Комитета полномочных представителей правительств государств-членов ОИЯИ (март 2014 г.).

The 116th session of the JINR Scientific Council took place on 25–26 September. It was chaired by JINR Director V. Matveev and Professor M. Waligórski of the H. Niewodniczański Institute of Nuclear Physics and Oncology Centre (Kraków, Poland).

The Scientific Council paid tribute to Professor Vladimir Kadyshevsky, an outstanding theoretical physicist and the Scientific Leader of JINR. As Director of JINR during 1992–2005, he made a great contribution to the successful operation and development of the Joint Institute for Nuclear Research based on broad international cooperation. Vladimir Kadyshevsky was a true advocate of fundamental science, strongly believing in the role of science in bringing nations together. It was thanks to his efforts that this Scientific Council of JINR became truly international, composed not only of representatives of the JINR Member States but also of scientists from leading research centres of other countries collaborating with JINR. His extraordinary dedication to science, amiable and kind attitude to people will be sorely missed.

V. Matveev informed the Scientific Council about the progress in implementing the recommendations of its 115th session and of the decisions of the session of the