



Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Кафедра суперкомпьютеров и квантовой информатики

Кузьминский Андрей Владиславович

Полифония полостей в квантовой электродинамике

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

Научный руководитель:

д.ф-м.н., профессор

Ю.И.Ожигов

Москва, 2024

Содержание

1 Введение	3
2 Постановка задачи	4
3 Математическая справка	5
3.1 Расширение сценария на решётку полостей	6
3.2 Рабиевские осцилляции	6
3.3 Неустойчивая связь	7
4 Амплитуды волноводов	8
4.1 Рабиевские осцилляции	8
4.2 Неустойчивая связь	13
5 Исследование влияние формы графов	17
5.1 Рабиевские осцилляции	17
5.2 Неустойчивая связь	26
6 Исследование влияние формы графов	31
6.1 Рабиевские осцилляции	32
7 Заключение	37
8 Список литературы	38
9 Пример программы для исследования формы графов для рабиевских осцилляций	39

1 Введение

Многие прикладные области наук: квантовая химия, сейсмика, компьютерное моделирование сложных объектов, криптография и многие другие - страдают от обилия задач класса NP, с которыми не справляются даже самые мощные современные суперкомпьютеры. Химия является одной из такой наук. Более того, химия до сих пор является эмпирической наукой, в силу безумной сложности моделирования сложных химических процессов. Квантовый компьютер в смеси с некоторым численным моделированием упрощённых систем является решением данной проблемы, так как квантовая механика описывает все процессы на том уровне, на котором, собственно, химия и работает. Сложность заключается в том, что даже квантовый компьютер не сильно упрощает задачу: из-за быстро растущей сложности требуется большей кубитов, а больше кубитов ведут к серьёзной нестабильности, и вот уже 30 лет данная проблема по прежнему не решена, потому мы пытаемся не опираться на него в полной мере. Вместо этого мы пытаемся упростить уже существующие модели. Например, конечномерную модель химии, на основе некоторой эмпирической статистики, наблюдений, физических (в первую очередь квантовых) и химических законов, которая сможет в нужном нам приближении просчитать все нужные нам химические и, соответственно, биологические процессы.

В данной работе исследуются зависимости от различных параметров явления распространения сложных динамических сценариев, начинающихся в одной полости (или в нескольких), на все остальные. Полости соединены волноводами. Исследуются зависимости, вплоть до самих сценариев, условий распространения, скорости распространения и их зависимостей от параметров.

Предположение наличия данного аналога оправдано, так как микробиолог Лью Монтье открыл и доказал [1] механизм "воиспроизведения ДНК" посредством квантовых эффектов.

Также эта работа важна для выявления важных параметров в химических системах [7], напрямую влияющих на "глобальное" поведение оных, и выявление тех физических эффектов/параметров/процессов, которые можно опустить в силу того, что они не влияют глобально на саму динамику, а лишь, в лучшем случае, её зашумляют, в худшем - вообще не оказывают никакого влияния, кроме усложнения моделирования. ([8])

2 Постановка задачи

Целью данной работы является исследование распространения динамических сценариев на остальные полости и исследование его поведения в зависимости от разного рода характеристик, а именно:

- Амплитуды интенсивности волноводов
- Формы графов
- Длин волноводов

Сценарии, на основе которых будут проводиться исследования:

- Рабиевские осцилляции.
- Неустойчивая связь. (Придуманный сценарий, но с особыми свойствами, из-за которых сильно меняются результаты, дальше в работе будет объяснено, почему именно такое название)

Случаи, где число частиц больше числа, необходимого для запуска 1 сценария, в данной работе не рассматривается, так как процессы с превосходящим минимальным числом частиц обладают такими же свойствами, что и процессы с таковым числом частиц, но они являются менее демонстративными в силу того, что характер их поведения уникален для каждого сценария. Другими словами, новых явлений, которые возникали бы из-за формы графа или его параметров - нет.

3 Математическая справка

Эволюция состояния происходит под воздействием гамильтониана H (Квантового наблюдаемого) согласно уравнению Шрёдингера:

$$i|\dot{\Psi}(t)\rangle\hbar = H|\Psi(0)\rangle, \text{ где}$$

$|\Psi(t)\rangle$ - состояние в момент времени t ,

H - гамильтониан,

\hbar - постоянная Планка

Решением данного уравнения является - $|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\Psi(0)\rangle$. Или, если перейти к базису из собственных векторов гамильтониана (по спектральной теореме, в силу эрмитовости H , он обязательно существует), решение будет выглядеть так: $|\Psi(t)\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} (\langle \Phi_i | \Psi(0) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} |\Phi_i\rangle)$, где

E_i - собственное число гамильтониана H ,

$|\Phi_i\rangle$ - собственный вектор, соответствующий E_i ,

N - размерность гамильтониана H

В данной работе слово "сценарий" и "гамильтониан" будут взаимозаменяемые, так как фактически каждый гамильтониан описывает какой-то конкретный сценарий динамики эволюции состояний.

Далее описываются все используемые в данной работе сценарии.

Используемые стандартные операторы:

- a^\dagger - оператор создания фотонов: $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$;
- a - оператор уничтожения фотонов: $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$;
- σ - оператор релаксации атома: $\sigma|1\rangle = |0\rangle$, $\sigma|0\rangle = 0$;
- σ^\dagger - оператор возбуждения атома: $\sigma^\dagger|0\rangle = |1\rangle$, $\sigma^\dagger|1\rangle = 0$;

Данные операторы выводятся напрямую из уравнений Максвелла.

Для простоты в данной работе все частоты фотонов, интенсивности взаимодействия атомов с полем и любые другие характеристики, влияющие лишь на саму динамику, а не на решётку, по которой она должна распространяться, будут одинаковыми, если не оговорено иное. [6]

3.1 Расширение сценария на решётку полостей

В принципе, все данные сценарии можно описать следующим образом: есть некоторый гамильтониан, действующий на 1 полость. К этому гамильтониан добавим сумму:

$$\sum_{i=1}^P \left(\sum_{j=1, j \neq i}^P (\gamma_{ij} S_i R_j + \overline{\gamma_{ij}} R_i S_j) \right), \text{ где}$$

S_i - удалить частицы из полости i ,

R_j - добавить частицы в полость j

Данная формула описывает переход некоторых частиц из одной полости в другую с интенсивностью $\gamma_{ij} = |\gamma_{ij}| e^{-i\alpha l}$, где l - длина волновода, α - некоторый коэффициент, описывающий скорость изменения фазы в зависимости длины пройденного пути, например длина волны, которую порождает фотон (В наших экспериментах он всегда будет равен 1). Волноводы мы берём идеальные, поэтому амплитуда никак не зависит от длины волновода. В наших экспериментах она будет равна 2π , если не сказано иное.

Теперь исходный гамильтониан просуммируем столько раз, сколько полостей способны воспроизвести нашу динамику, а именно возьмём K операторов следующего вида:

$I_1 \otimes \cdots \otimes I_{i-1} \otimes H_i \otimes I_{i+1} \otimes \cdots \otimes I_P$, где

I_i - единичный оператор для полости i ,

H_i - гамильтониан для полости i , в которой возможно воспроизведение динамики,
 K - число полостей, способных воспроизвести динамику.

В принципе, это весь алгоритм расширения динамики на решётку полостей.

3.2 Рабиевские осцилляции

Формат состояний: $|n; k_1, k_2, \dots, k_m\rangle_i$ $i = \overline{1, P}$, где

P - число полостей,

n - число фотонов в полости,

k_i - состояние i -ого атома в полости

$$H_{TCN} = \sum_{k=1}^P (\hbar w_{ph} a_k a_k^\dagger + \hbar w_{at} \sum_{i=1}^{m_k} (\sigma_{k,i} \sigma_{k,i}^\dagger) + g \sum_{i=1}^{m_k} (a_k \sigma_{k,i}^\dagger + a_k^\dagger \sigma_{k,i})) + \sum_{i=1}^P \left(\sum_{j=1, j \neq i}^P (\gamma_{ij} a_i a_j^\dagger + \overline{\gamma_{ij}} a_i^\dagger a_j) \right), \text{ где}$$

g - амплитуда перехода между возбуждённым и основным состояниями атомов, (на самом деле для каждого атома это число уникально, но мы пока условимся, что у нас атомы идентичны)

w_{ph} - частота фотонов, w_{at} - частота атомов (у нас они будут равны 1 для более демонстративных картин)

m_k - число атомов в полости k

3.3 Неустойчивая связь

Формат состояний: $|el; bond; dist\rangle_i i = \overline{1, P} P$ - Число полостей.

el - наличие электрона в полости i ,

$bond$ - образование связи электрона, допустим, с некоторым ионом в полости,

$dist$ - дистанция электрона от иона

S_i, R_i будут применимы к электрону.

$$H_{elbond} = \sum_{i=1}^P (H_{bond_i} Check(dist_i = 0, el_i = 1) + H_{dist_i} Check(bond_i = 1, el = 1)) + \sum_{i=1}^P \left(\sum_{j=1, j \neq i}^P ((\gamma_{ij} S_i R_j + \overline{\gamma_{ij}} R_i S_j)) \right), \text{ где}$$

H_{bond_i} - гамильтониан образования связи в полости i , совпадает с оператором $g_{bond}\sigma_x$,

где g_{bond} - амплитуда перехода, σ_x - оператор Паули.

H_{dist_i} - гамильтониан отдаления/приближения электрона к иону в полости i , совпадает с оператором $g_{dist}\sigma_x$ - где, g_{dist} - амплитуда перехода, σ_x - оператор Паули.

4 Амплитуды волноводов

В данной главе рассматривается исследование зависимости между передачей сценария и амплитудой волновода.

Моделирование будет происходить на 2 полостях, соединённых волноводом.

4.1 Рабиевские осцилляции

Параметры оригинальной модели - $g = 0.01, h = 1, w = 1$, начальное состояние - 1 фотон в 1 полости

Сначала продемонстрирую оригинальную динамику.

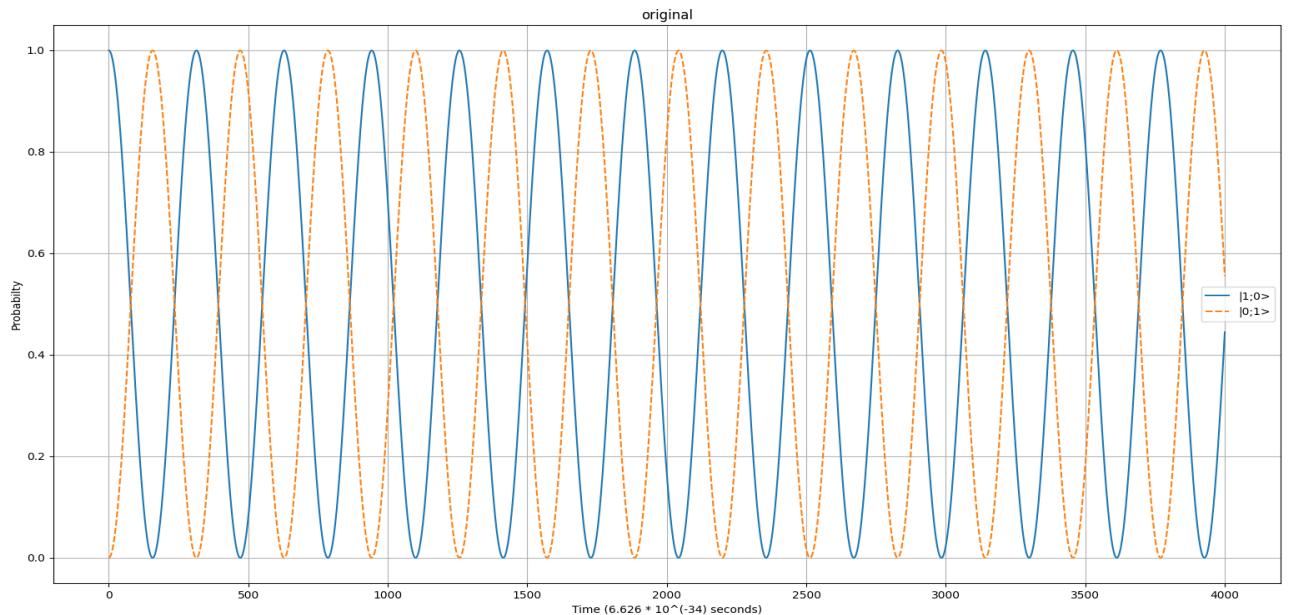


Рис. 1: Оригинальная динамика

Теперь добавим 2 полость.

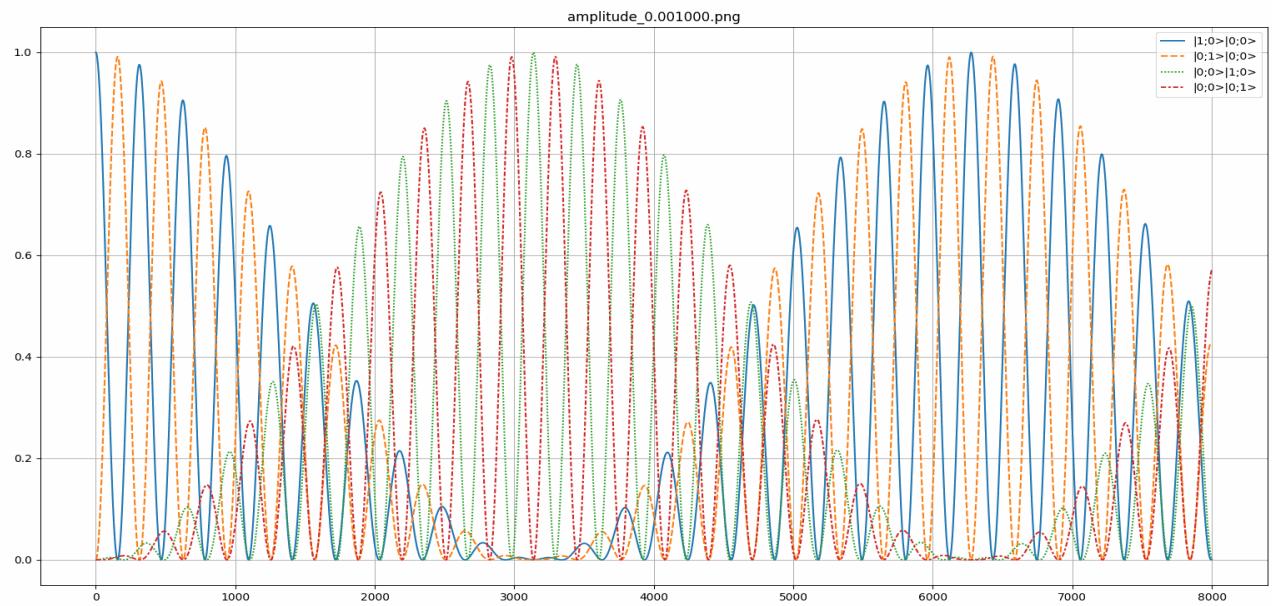


Рис. 2: Динамика в 2 полостях

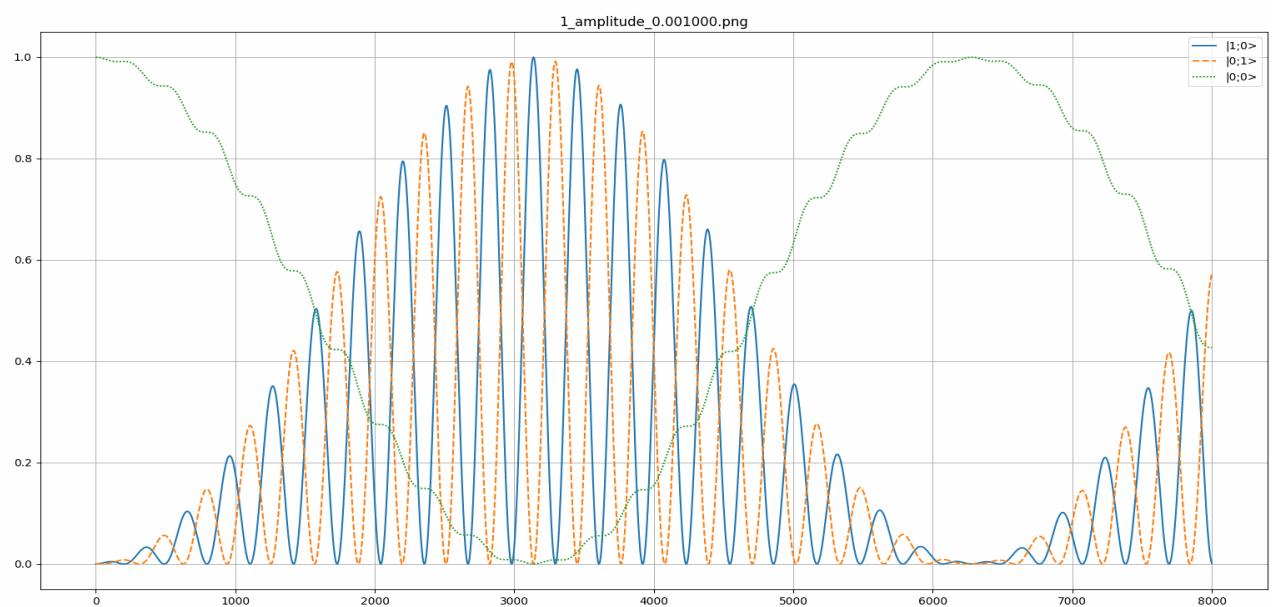


Рис. 3: Динамика в целевой полости

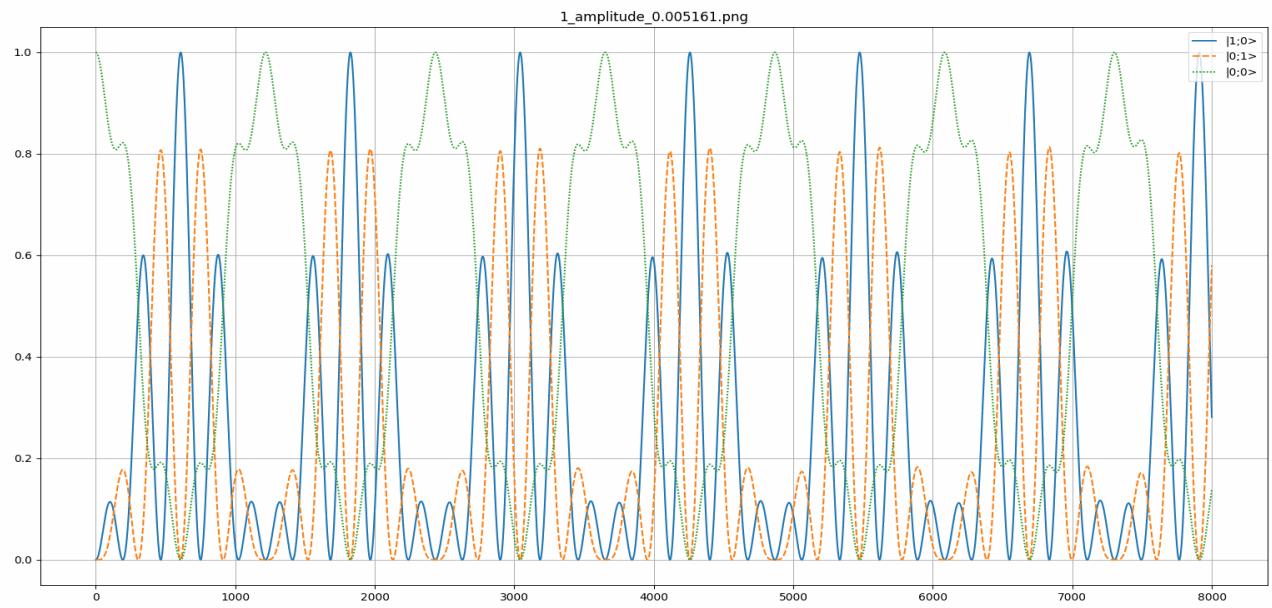


Рис. 4: 1 резонанс

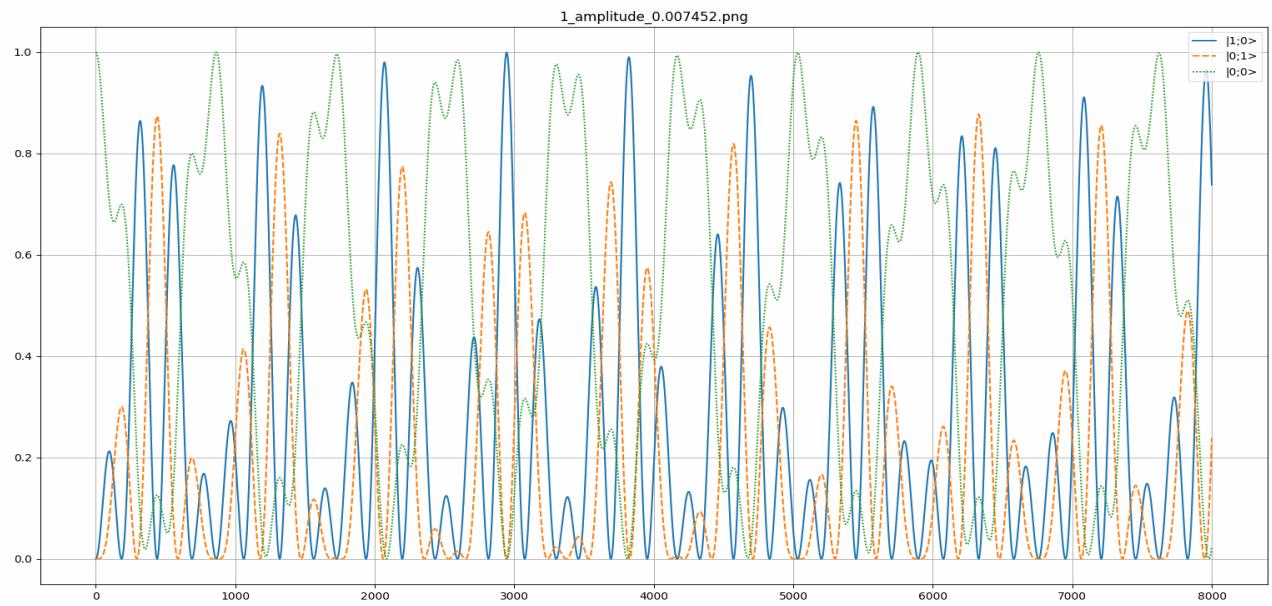


Рис. 5: После 1 резонанса

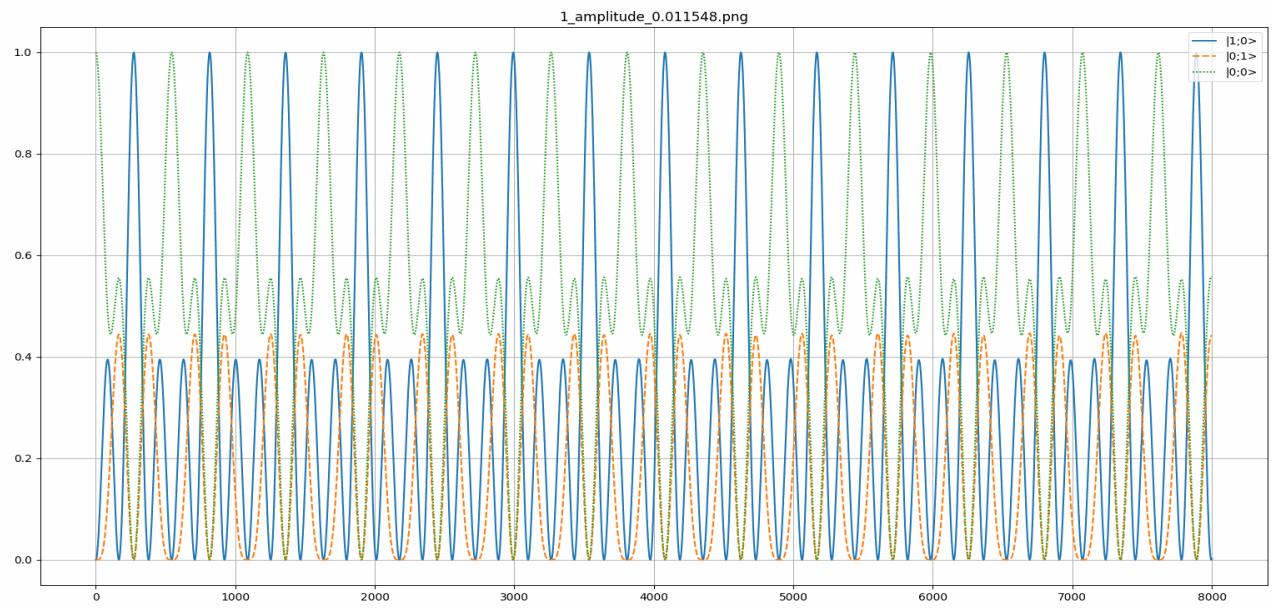


Рис. 6: Сильный резонанс

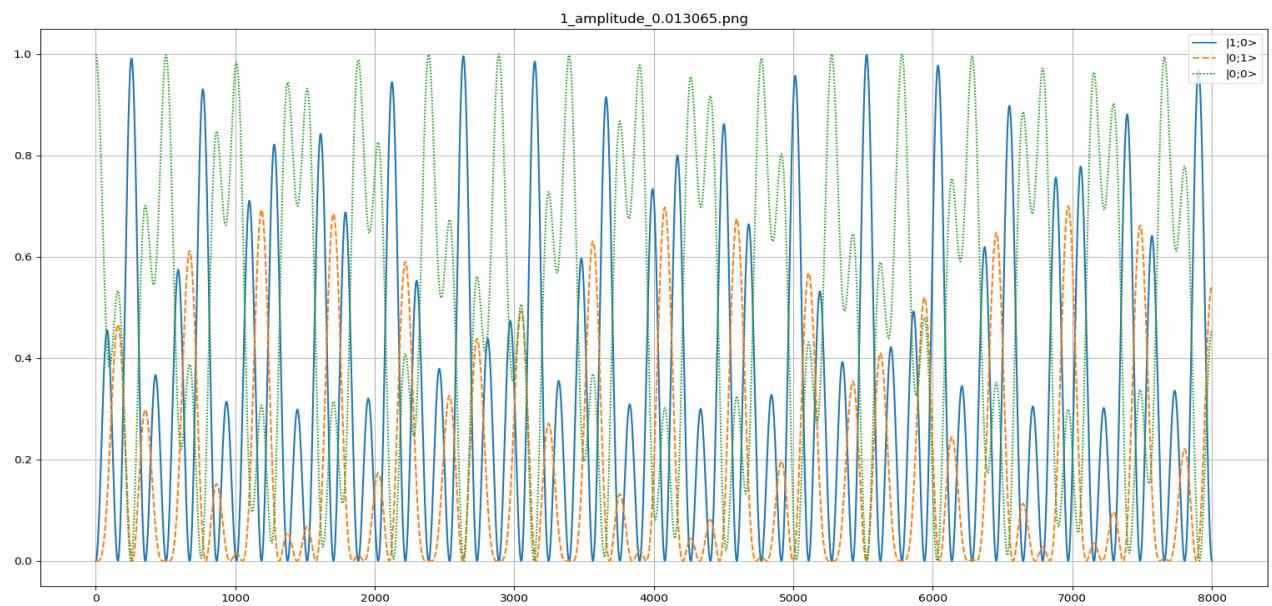


Рис. 7: После сильного резонанса резонанс

Как видно на этих графиках, амплитуда напрямую влияет не только на передачу динамики, но и на саму динамику. При некоторой амплитуде она передаётся без изменений, увеличение может уменьшить период колебаний амплитуд динамики из одной полости в другую. Но при некоторых амплитудах происходит нечто, похожее на резонанс, когда волнобразное перетекание динамики выравнивается в прямую линию. Первый раз это происходит при амплитуде равной примерно 0.0052 - далее волнобразные перетекания начинают перекрещиваться друг с другом, вплоть до следующего резонанса, после которого число пересечений увеличивается. И с каждым новым резонансом динамика становится всё менее похожая на оригинальную, так как фотон быстрее перетекает из полости в полость, что рушит оригинальную динамику, но при этом, видоизменённая под воздействием новой полости динамика по прежнему передаётся в полной мере. Отсюда вывод, что новая полость может не только разделять динамику с уже "запущенной" полостью, но и напрямую, лишь фактом своего присутствия, влиять на вероятностную эволюцию в ней, при этом даже необязательно, чтобы там была система, способная повторить исходный сценарий.

4.2 Неустойчивая связь

Параметры оригинальной версии - $g_{dist} = 0.01$, $g_{bond} = 0.2$, начальное состояние - далёкий электрон в 1 полости без связей в системе.

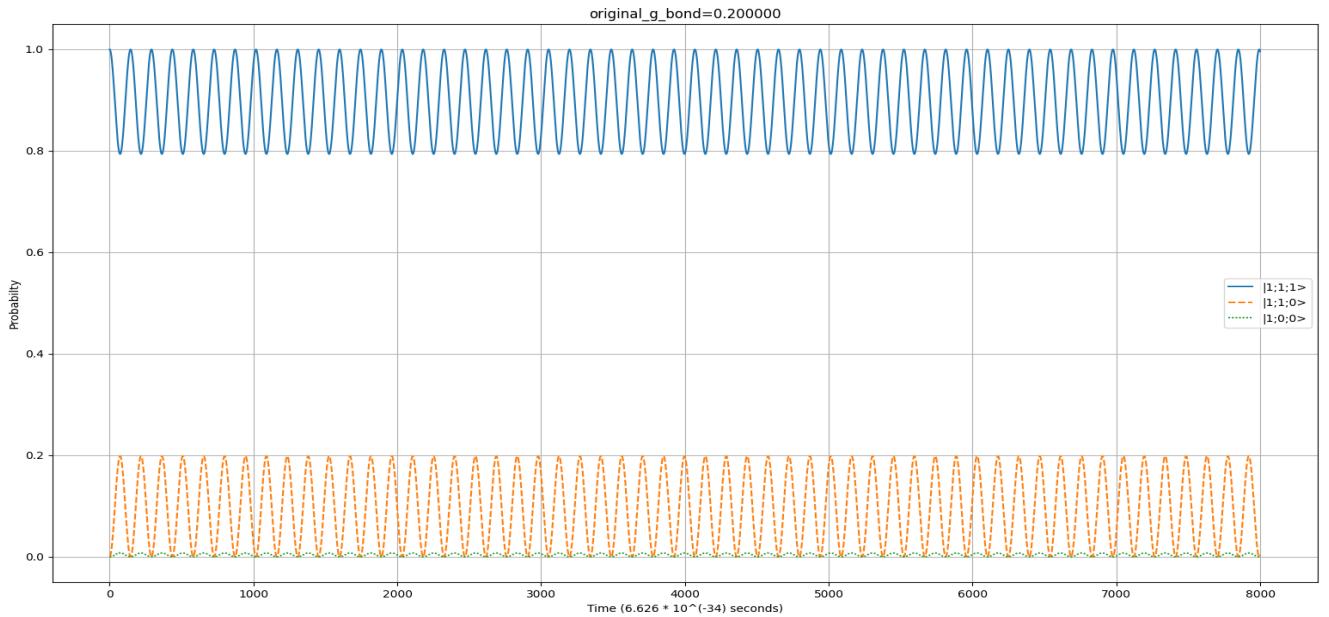


Рис. 8: Оригинальная динамика

Теперь добавим 2 полость.

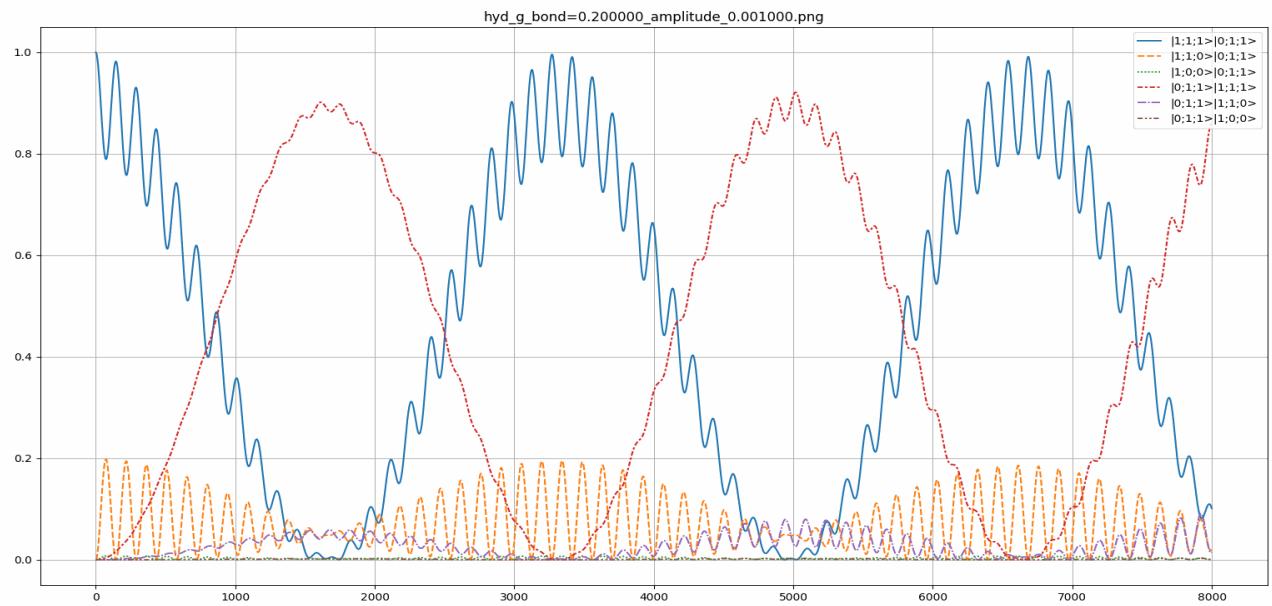


Рис. 9: Динамика в 2 полостях

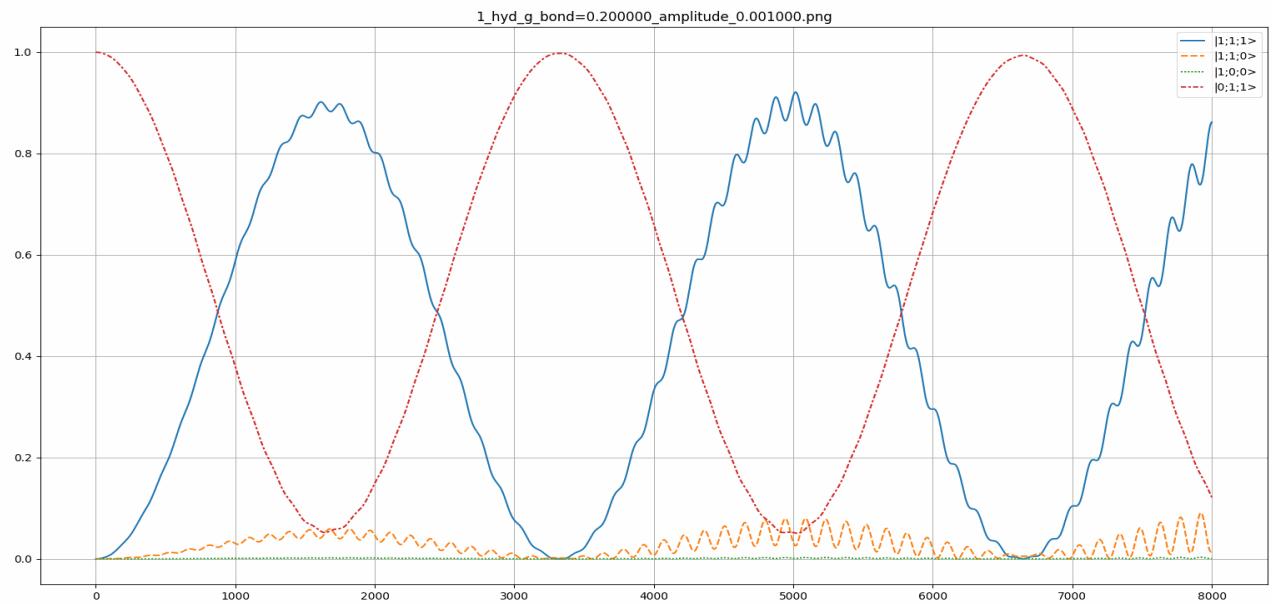


Рис. 10: Динамика в целевой полости

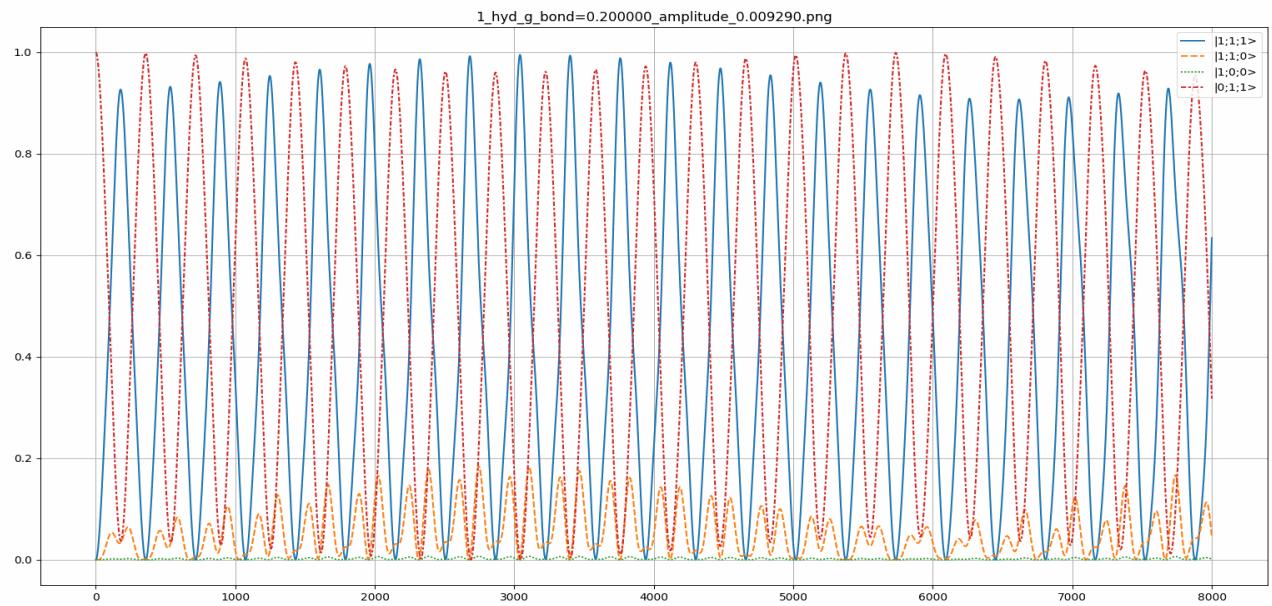


Рис. 11: Резонанс

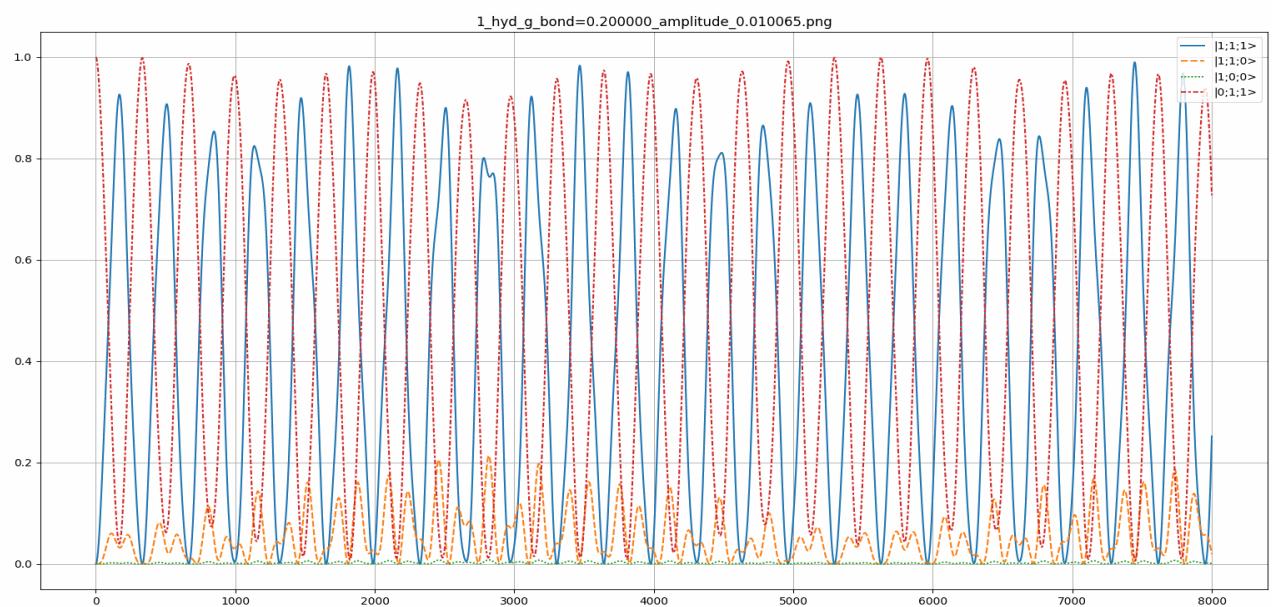


Рис. 12: После резонанса резонанс

Данная динамика примечательна тем, что по своей сути она не использует передаваемый ресурс в полной мере, а именно - вероятность того, что электрон сблизится (или образует даже связь) не превышает 25%, из-за чего полость с данной системой задерживает электрон куда слабее, чем рабиевские осцилляции задерживают фотон. Далее я буду называть динамикой **устойчивой**, если минимальная сумма вероятностей состояний, из которых передаваемые ресурсы могут утечь в другие полости, суммарно меньше 1%, в противном случае - **неустойчивой** (отсюда и название).

При данной динамике можно заметить существенное отличие. Поскольку сама по себе динамика является неустойчивой, электрон охотно взаимодействует с остальными полостями, что порождает очень плавный рост амплитуды, а резонанс не до конца "выпрямляет" волнообразное поведение динамики. При этом интерференция волн вероятности происходит даже при очень маленьких амплитудах. Это значит, что амплитуда резонанса и сам его вид напрямую зависит от удержания динамикой перемещающегося ресурса (в данном случае электрона).

По итогу, мы видим, что динамика передаётся всегда, но при некоторых амплитудах может возникнуть "резонанс при амплитудах выше" - динамика начинает интерферировать сама же с собой. Более детальные взаимосвязи между резонансом и остальными параметрами определить пока не удалось.

5 Исследование влияние формы графов

В данной главе мы исследуем влияние самой формы графа на процесс передачи динамики.

5.1 Рабиевские осцилляции

Параметры оригинальной модели - $g = 0.01, h = 1, w = 1$, начальное состояние - 1 возбуждённый атом в 1 полости

Сначала продемонстрирую оригинальную динамику.

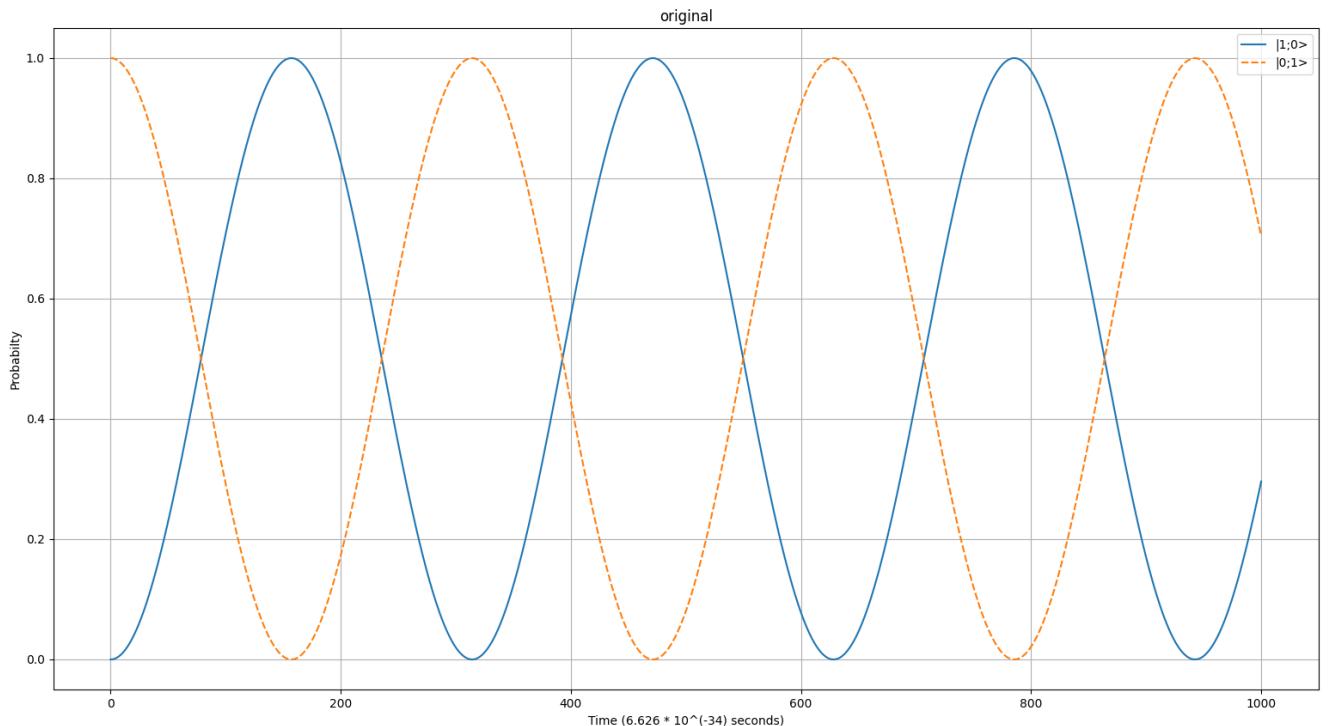


Рис. 13: Оригинальная динамика

Теперь продемонстрируем на графах.

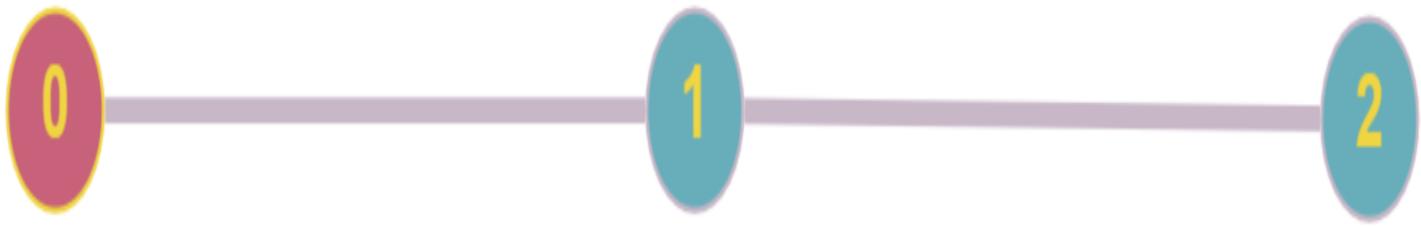


Рис. 14: Граф - 3x1x1



Рис. 15: Динамика в графе 3 на 1. Целевая полость



Рис. 16: Граф - 2x2x1

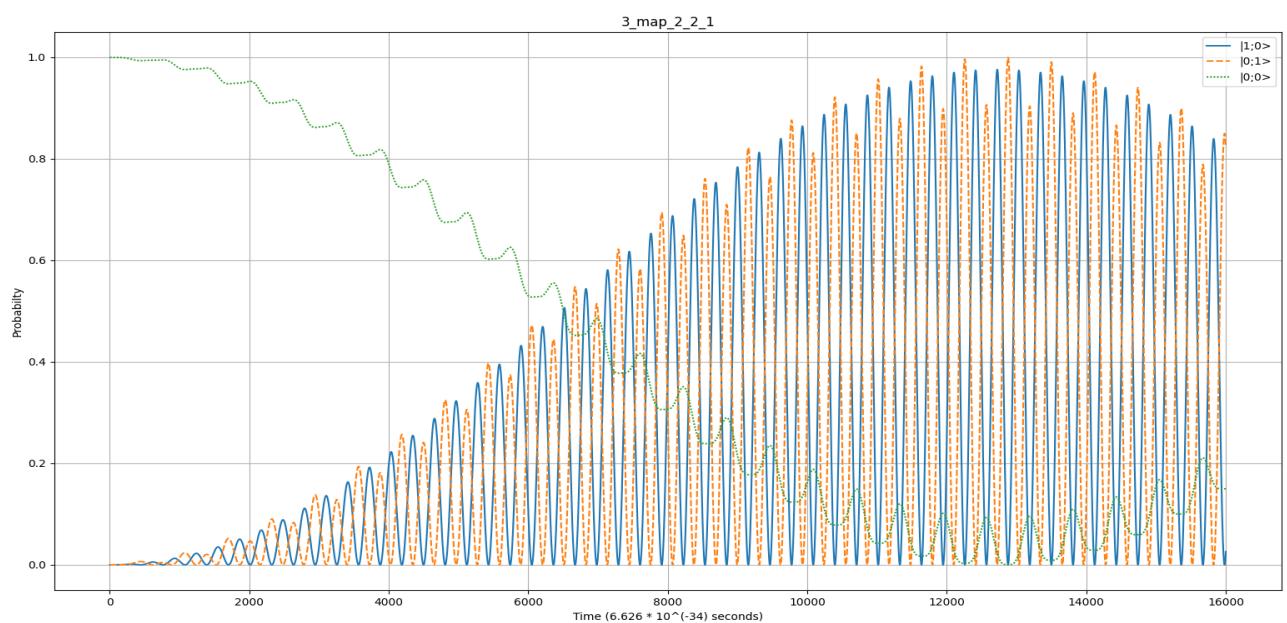


Рис. 17: Динамика в графе 2 на 2. Целевая полость

Можно заметить полное совпадение динамики. На самом деле здесь я продемонстрировал зависимость между амплитудами графов, с одинаковой длиной кратчайших путей, но с их разным числом. Если у 1 графа p таких путей, у 2 графа q , их длина (число ветвей) равна r , амплитуда 1 графа = a , амплитуда 2 графа = b , то тогда для равенства должна выполняться формула $pa^r = qb^r$.

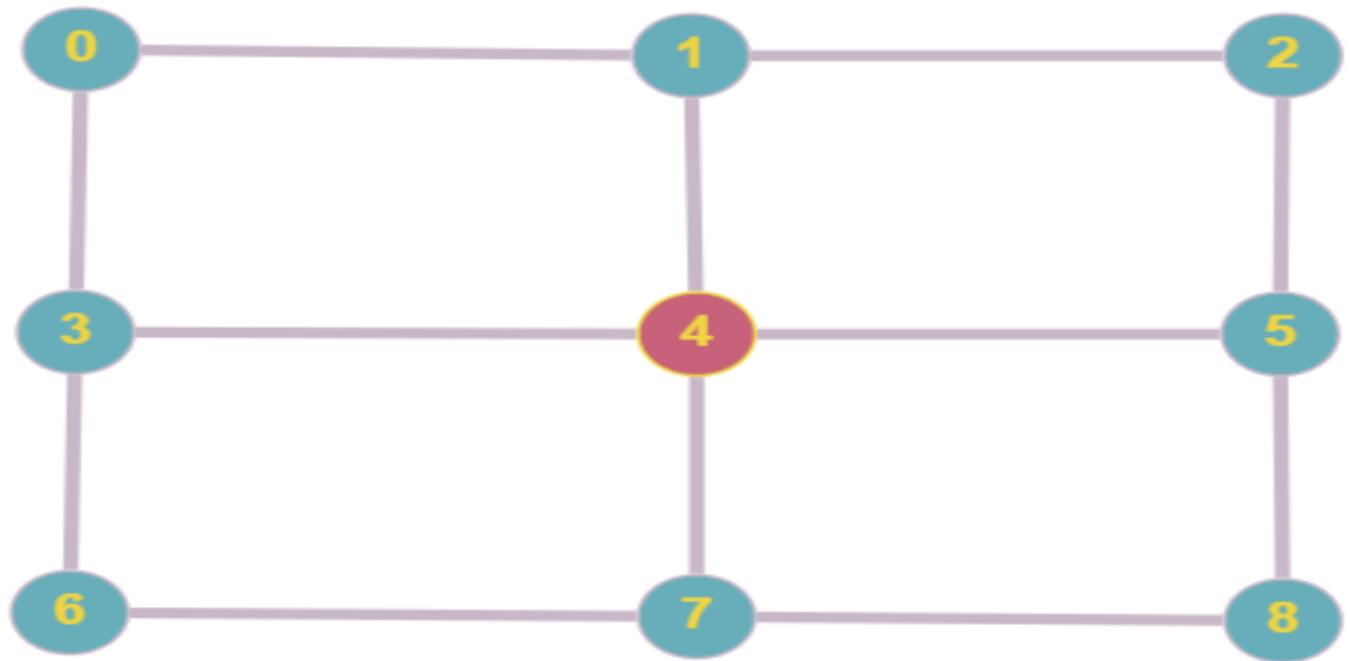


Рис. 18: Граф - 3x3x1

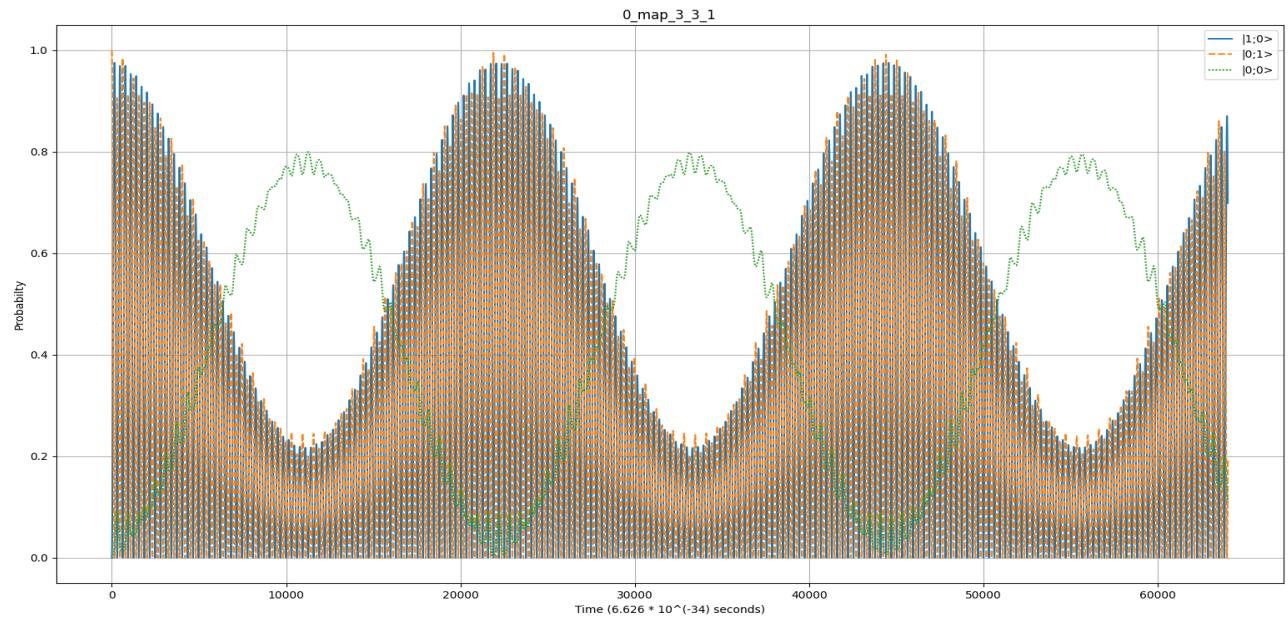


Рис. 19: Динамика в графе 3 на 3. Начальная полость.

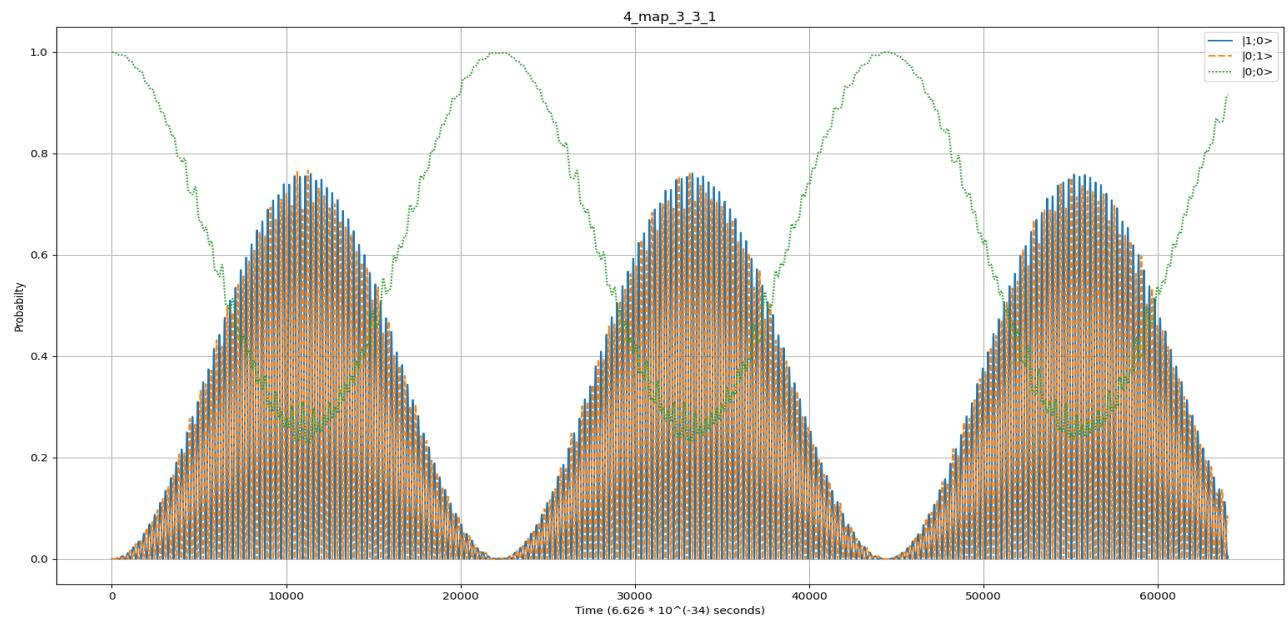


Рис. 20: Динамика в графе 3 на 3. Целевая полость в середине.

Данный график является расширением предыдущего, а именно, простым добавлением лишних полостей по краям. Как видно, лишь факт наличия этих полостей оказывает влияние на амплитуду динамики в целевой полости, что примечательно, именно на амплитуду целевой полости, в то время как амплитуда начальной полости остаётся максимальной. Более того, ни изменение амплитуд волноводов, ни увеличение силы взаимодействия частиц с фотонами (которая делает динамику более устойчивой к шуму от пустых полостей), ни перемещение начала динамики в целевую полость - никак не повлияли на амплитуду динамики в целевой полости. А влияет на амплитуду динамики только сама форма графа, но тут возникает вопрос, так от чего же зависит понижение амплитуды динамики. Дело в том, что, как динамика утекает из полости-источника, также после передачи она может утечь и из целевой полости, но может только туда, откуда динамика передаётся с очень малой интенсивностью (или вовсе не передаётся) по сравнению с остальными полостями. Поэтому в графе 2 на 2 не было уменьшение амплитуды, ведь в этом графике по всем путям динамика перетекала с одинаковой интенсивностью то в одну полость, то в другую. В то время как в данном примере за целевой полостью находятся ещё пустые полости, куда динамика и распространялась дальше, так как со стороны них её ничего не удерживало. Если убрать эти волноводы (из 4 в 5 и из 4 в 7) - амплитуда станет максимальной, как и в остальных графах.

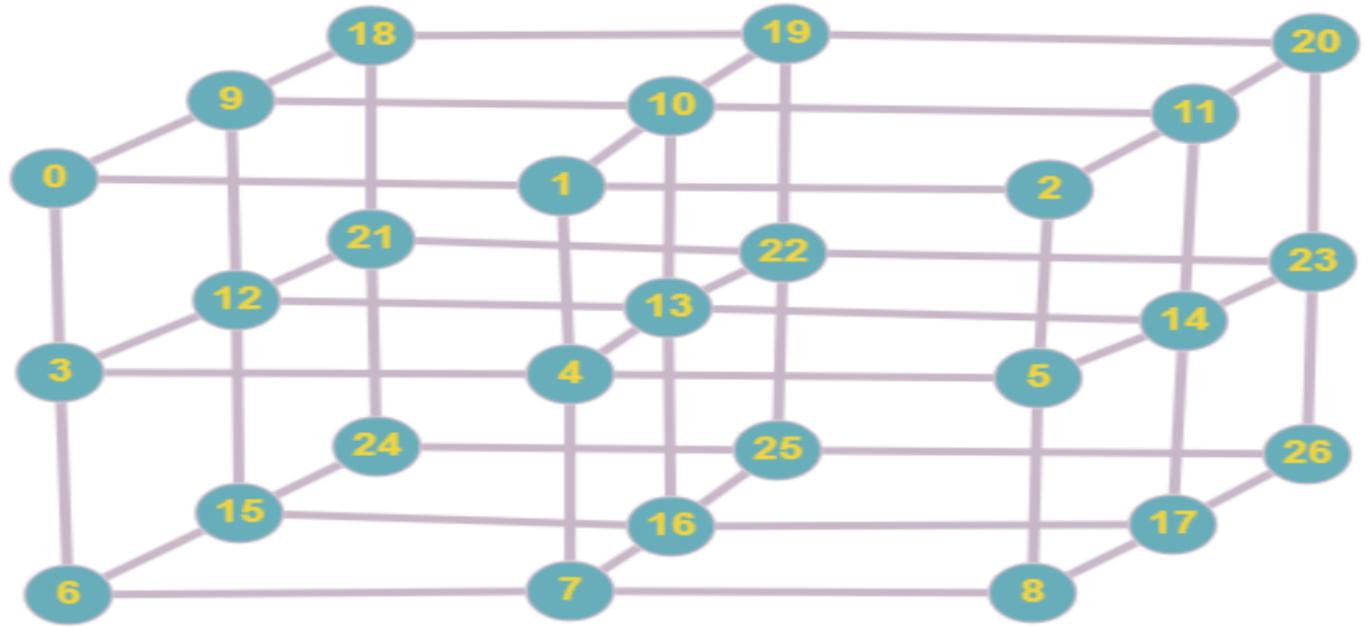


Рис. 21: Граф - 3x3x3

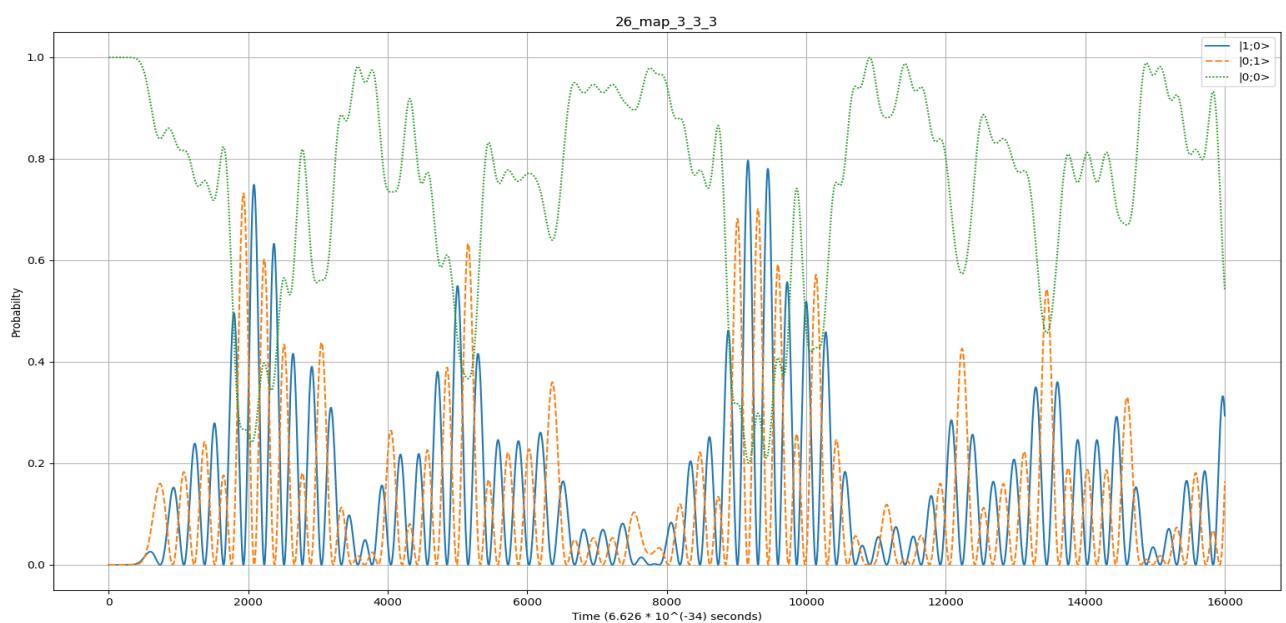


Рис. 22: Динамика в кубе размера 3. Целевая полость. (Динамика в оригинальной полости аналогична)

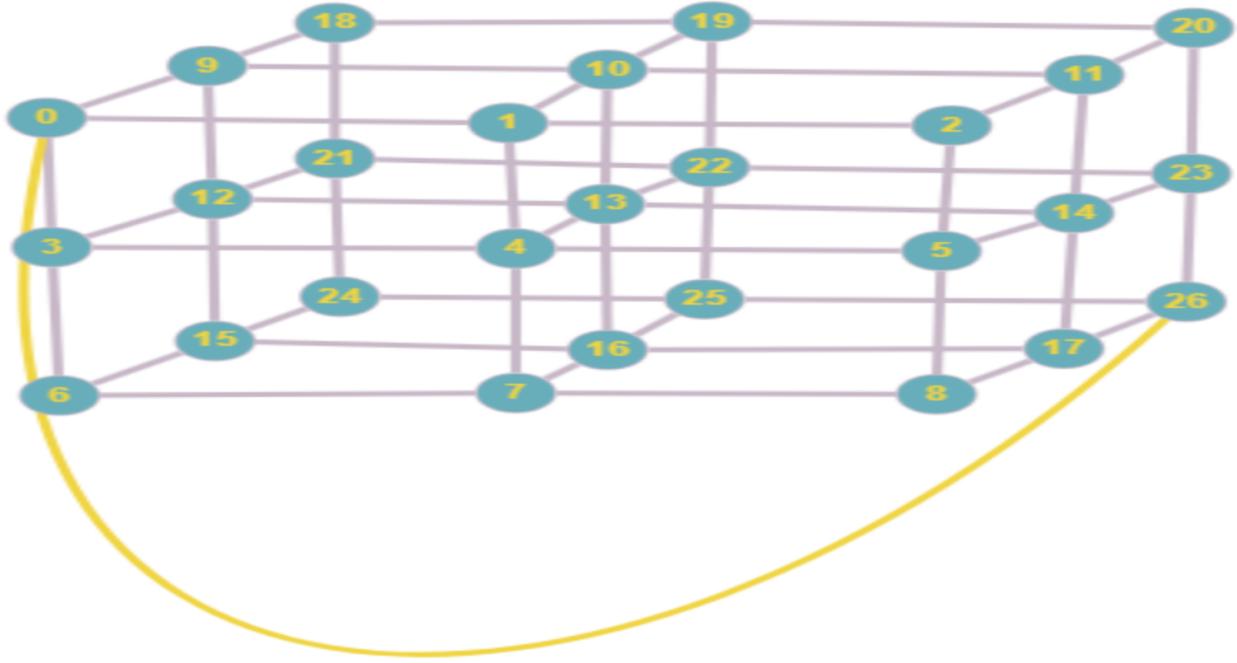


Рис. 23: Граф - 3x3x3 Начальная и целевая полость соединены

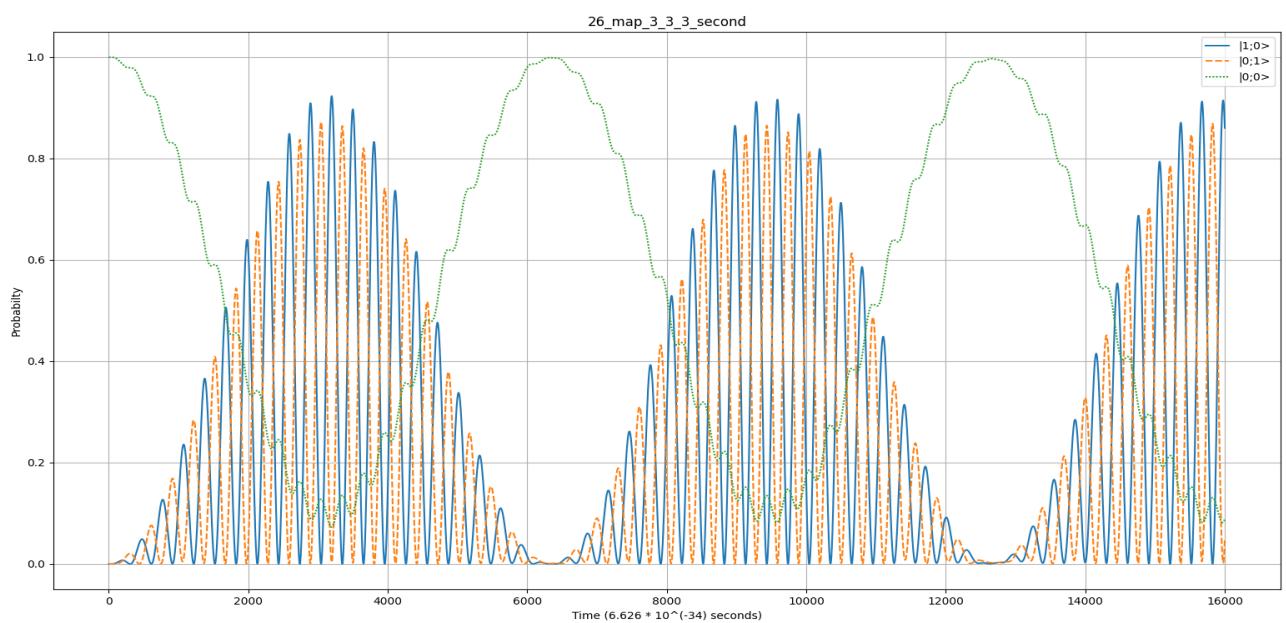


Рис. 24: Динамика в кубе размера 3, но начальная и целевая полость соединены. Целевая полость.

Сразу замечание, что на первом кубе амплитуда увеличена в 2 раза. Данные 2 графика показывают следующее:

- Первый график показывает сильное влияние при существенной амплитуде пустых полостей на саму динамику, а точнее, на её разрушение. При увеличении силы взаимодействия фотона с частицей шумы уменьшаются, то есть динамика становится более устойчивой и похоже на изначальную, но из-за этого уменьшается скорость передачи.
- Второй график очень похож на график лишь с 2 полостями, что демонстрирует, что динамика перетекает по всем путям, но влияние оказывает лишь путь с наибольшей амплитудой. (Нужно заметить, что амплитуды должны в путях должны отличаться на порядок, хотя для некоторых динамик (например для неустойчивой связи), это правило не работает, в том смысле, что любой путь будет иметь значение, то есть это работает только для устойчивых динамик)

Вынужден заметить, что мне не удалось выявить приблизительную формулу для малых амплитуд, чтобы сравнять динамики, как например в случаях линии 3 и графа 2 на 2, но для графов с разными длинами кратчайших путей. Проблема заключается в том, что она зависит от самой динамики, из-за которой формула для каждой из них ведёт себя уникальным образом.

5.2 Неустойчивая связь

Параметры оригинальной версии - $g_{dist} = 0.01$, $g_{bond} = 0.2$, начальное состояние - далёкий протон в 1 полости без водородных связей в системе

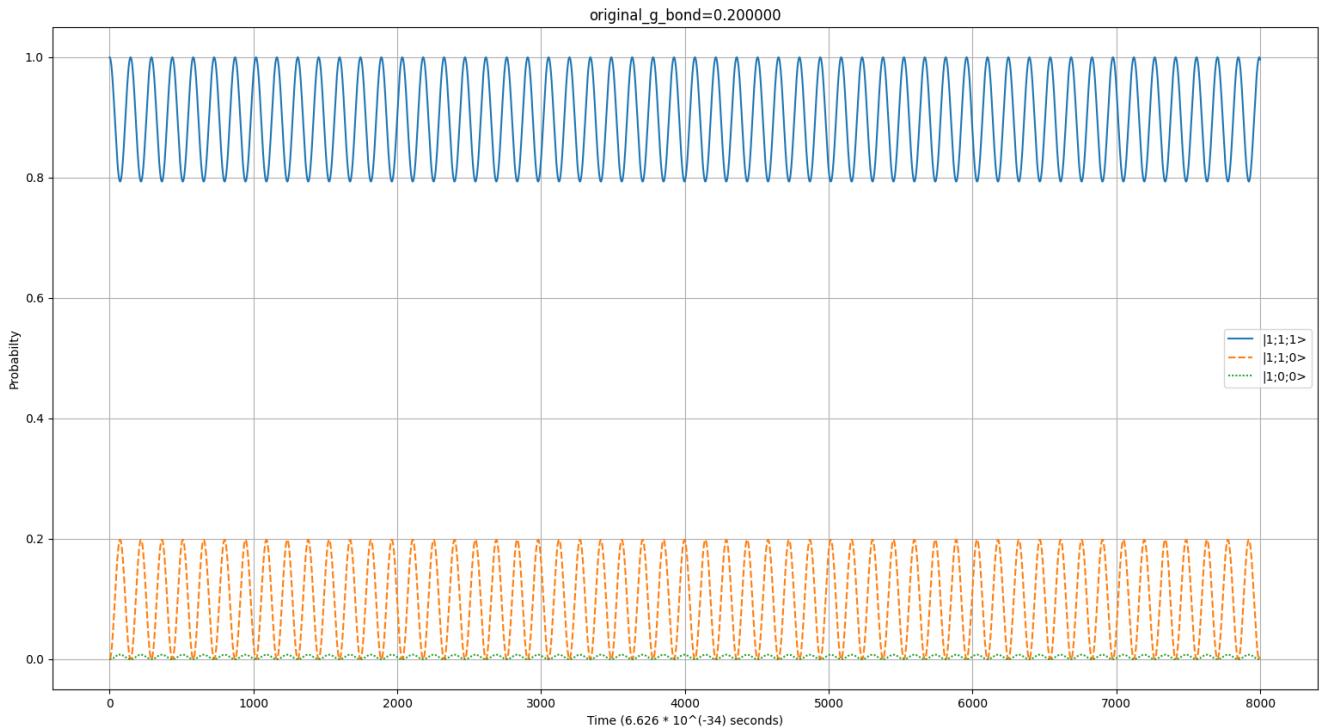


Рис. 25: Оригинальная динамика

Снова демонстрируем на тех же графах.

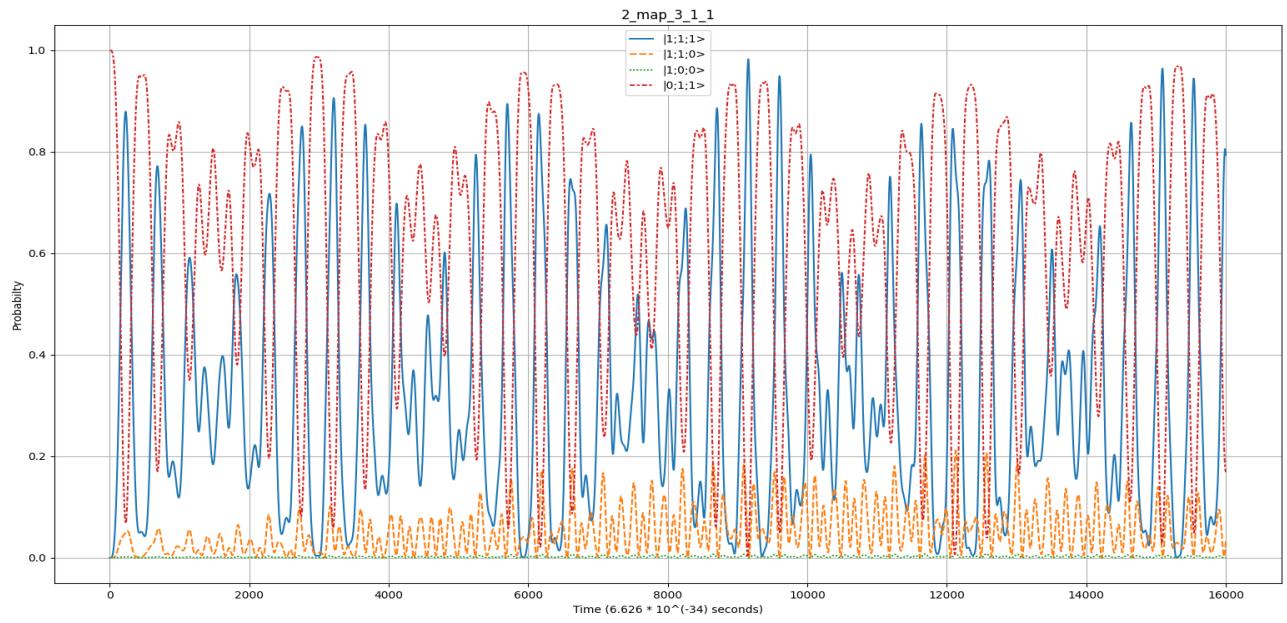


Рис. 26: Динамика в графе 3 на 1. Целевая полость

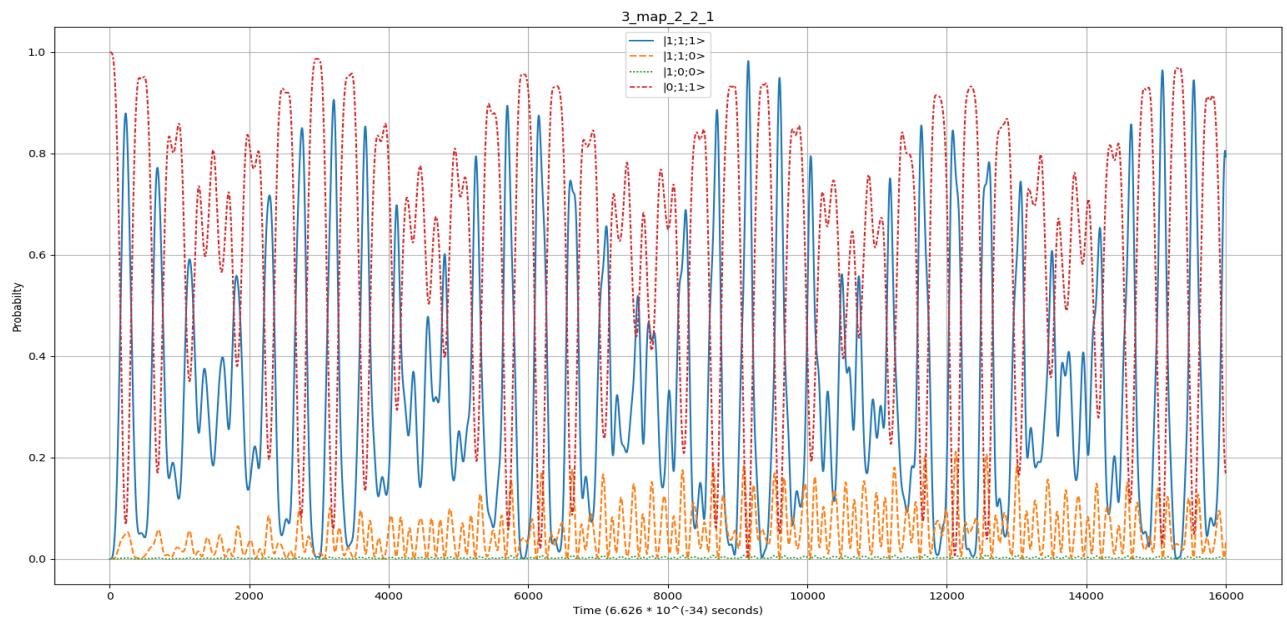


Рис. 27: Динамика в графе 2 на 2. Целевая полость

Как видим, для неустойчивых динамик зависимость также работает в полной мере.

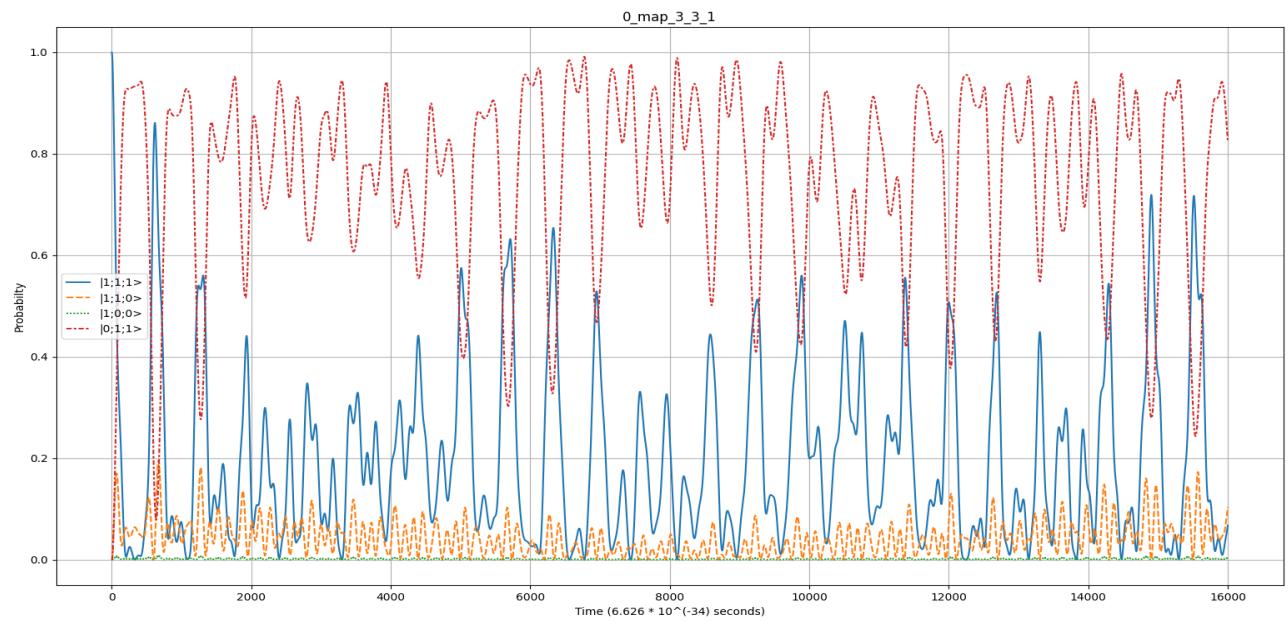


Рис. 28: Динамика в графе 3 на 3. Начальная полость.

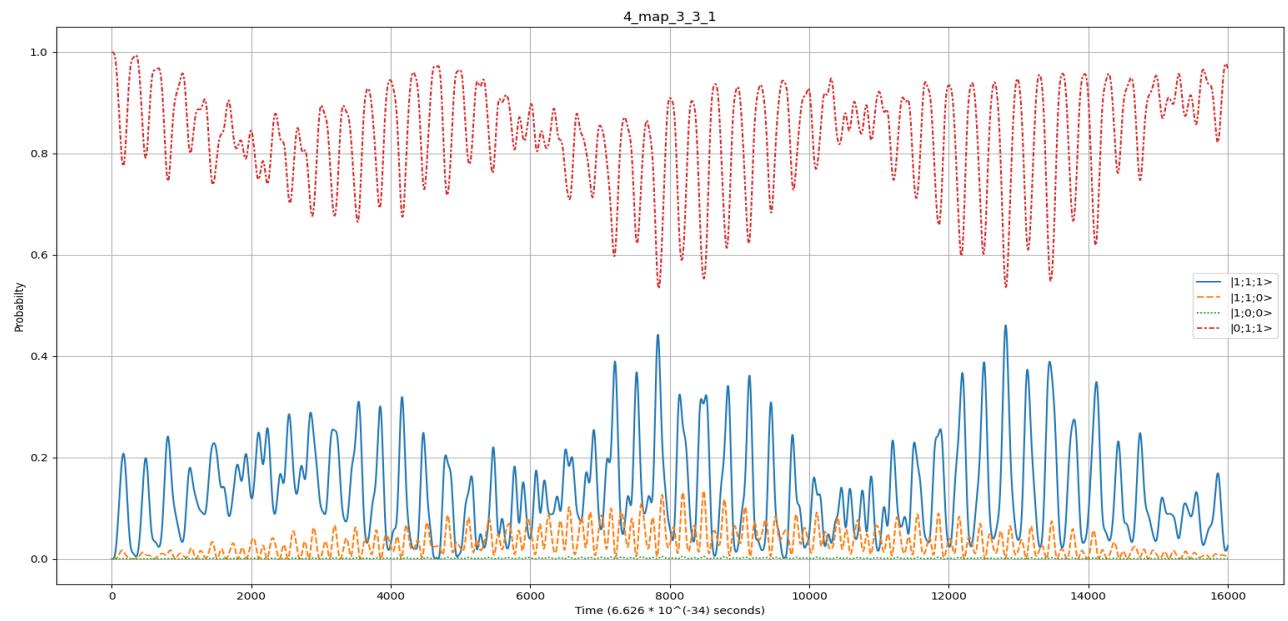


Рис. 29: Динамика в графе 3 на 3. Целевая полость в середине.

Как мы видим, мы можем наблюдать те же самые явления с уменьшением амплитуды. Здесь этот эффект виден куда сильнее, в силу того, что динамика неустойчивая.

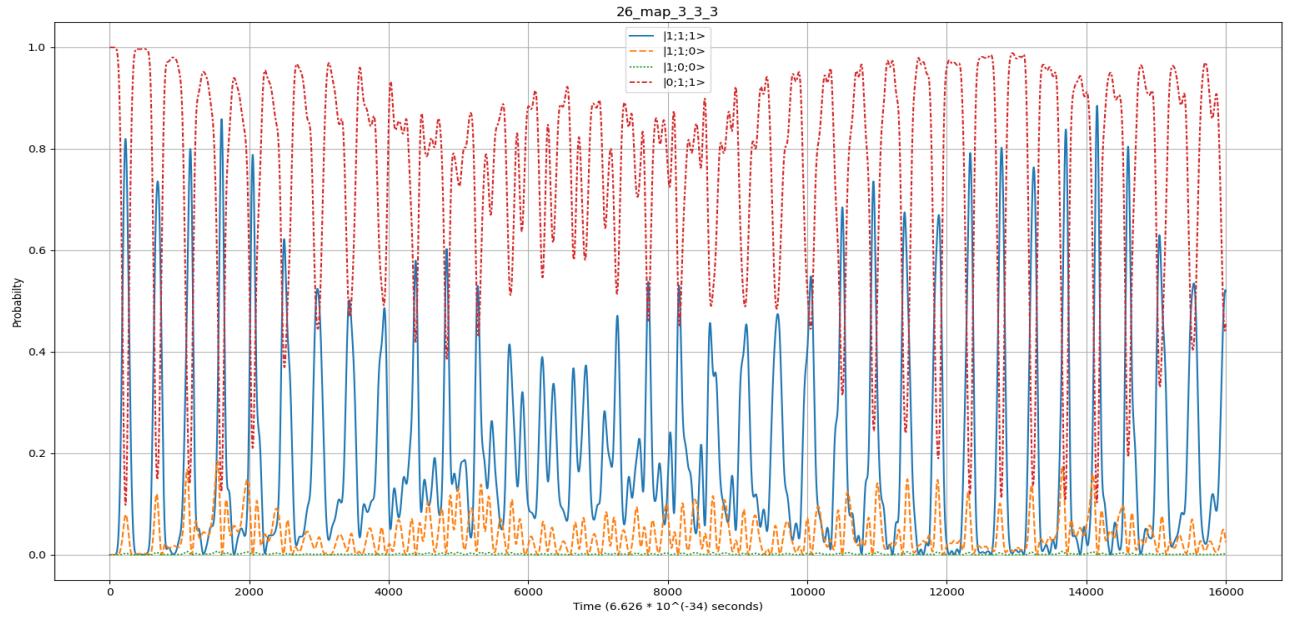


Рис. 30: Динамика в кубе размера 3. Целевая полость. (Динамика в оригинальной полости аналогична)

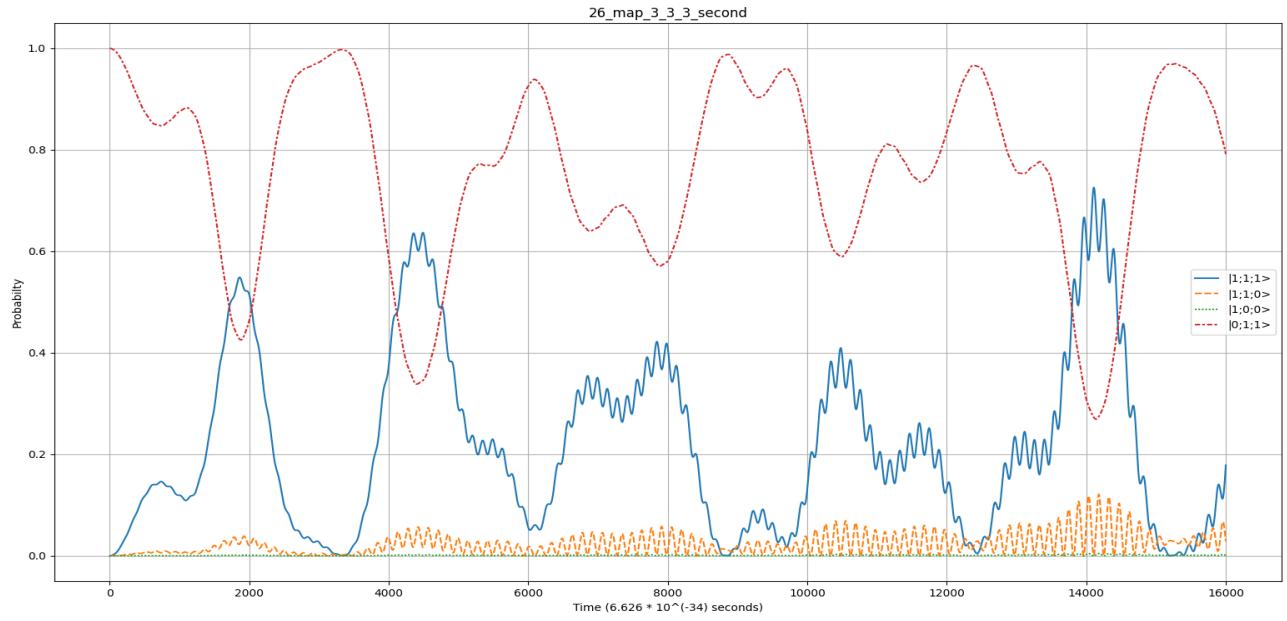


Рис. 31: Динамика в кубе размера 3, но начальная и целевая полость соединены. Целевая полость. Амплитуда волноводов уменьшена в 10 раз по сравнению с предыдущим кубом.

Здесь мы видим, что даже добавление кратчайшего пути не улучшает ситуацию. Дело в том, что пустые полости оказывают на неустойчивую динамику сильное влияние - большая часть и правда возвращается назад по самому короткому пути, но также существенная часть динамики уходит в оставшиеся полости, из-за этого происходит столь серьёзное уменьшение амплитуды динамики.

Открытый вопрос по данной теме - нахождение зависимости параметров для волноводов, чтобы скорость перетечки динамики между 2 разными графиками стала эквивалентной.

6 Исследование влияние формы графов

В данной главе мы исследуем влияние длин волноводов, которые, в свою очередь, будут менять фазы состояний. Наибольший интерес для нас представляют тёмные состояния, которые могут сами собой образоваться в системе [5].

Состояние называется тёмным, если не способно испустить фотон. Например, состояние $|n\rangle \frac{|10\rangle - |01\rangle}{\sqrt{2}}$ является тёмным, так как - рассмотрим переход от этого состояния к состоянию $|n+1\rangle|00\rangle$. Первая компонента состояния перейдёт в него с плюсом, вторая же с минусом, итого получаем:

$$\frac{|n+1\rangle|00\rangle}{\sqrt{2}} - \frac{|n+1\rangle|00\rangle}{\sqrt{2}} = 0$$

то есть, это значит, что 2 компоненты состояния взаимосокращают друг друга, и не дают атому релаксировать.

Аналог этой идеи продемонстрирован в данной главе, а также в принципе продемонстрирована зависимость от длины волноводов.

6.1 Рабиевские осцилляции

Рассмотрим сначала граф 2 на 2. Для всех волноводов выставим длину 2π , кроме волновода из полости 1 в полость 3, его длина будет равна π . Начальная полость - 0. Целевая - 3.

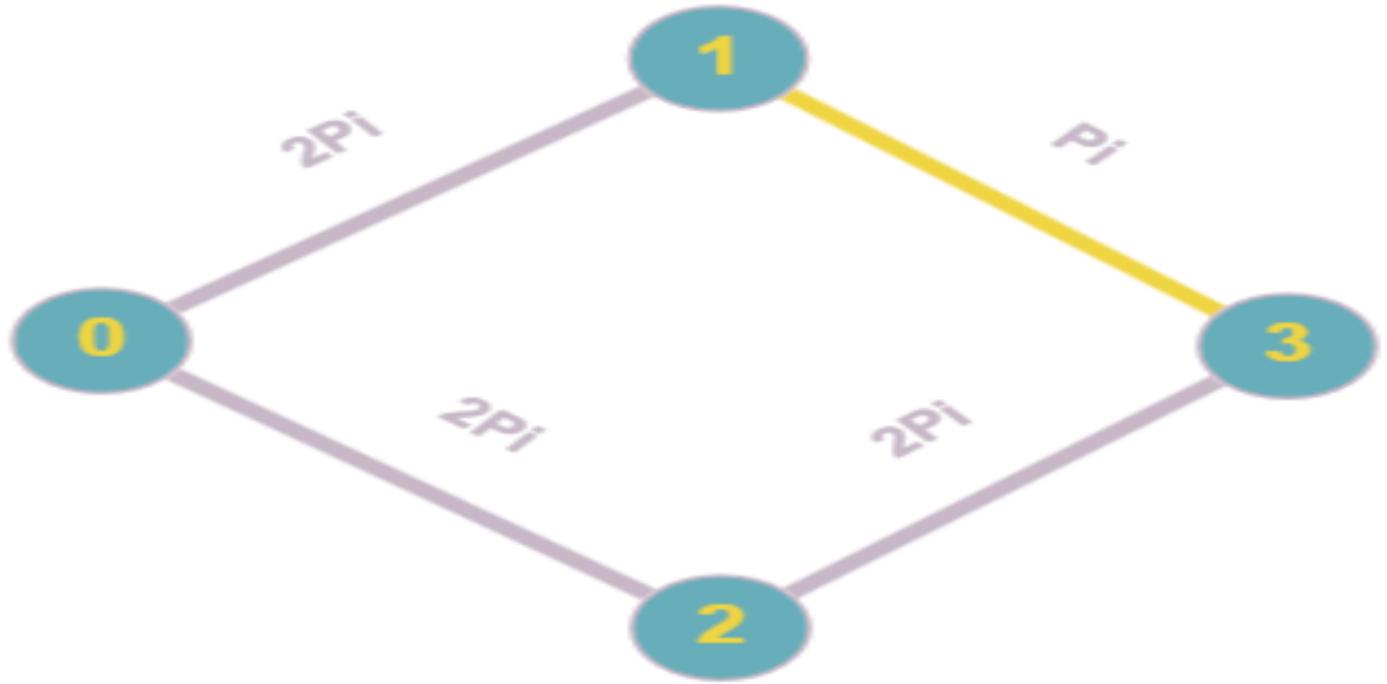


Рис. 32: Граф

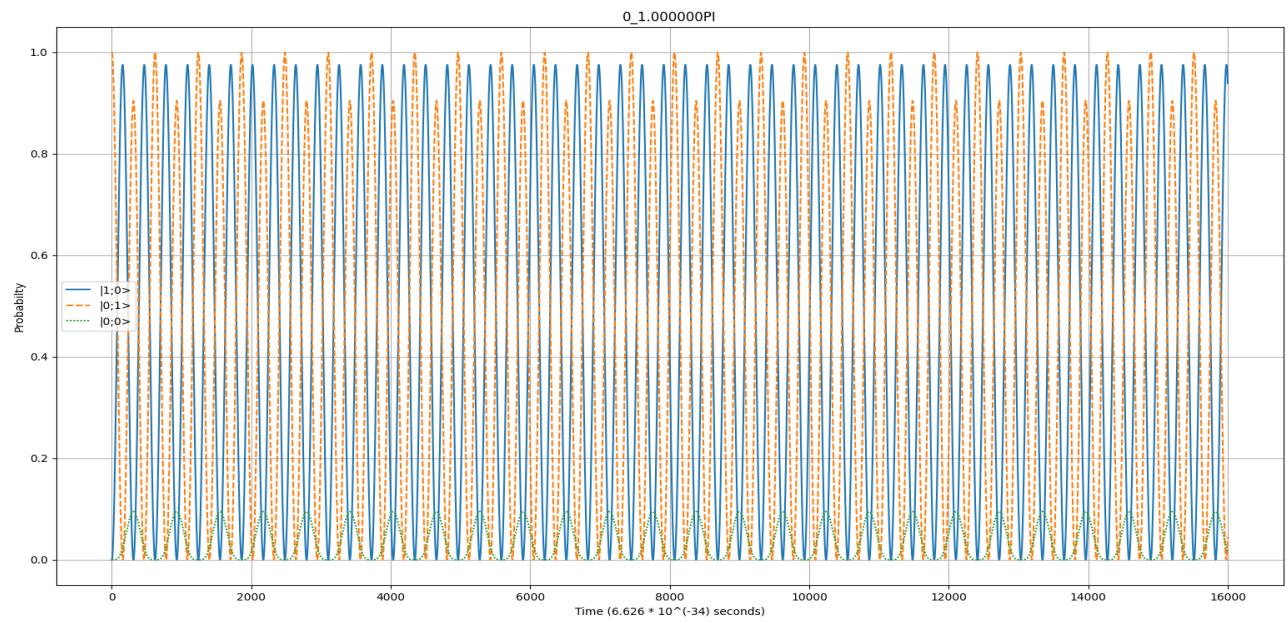


Рис. 33: Динамика в начальной полости.

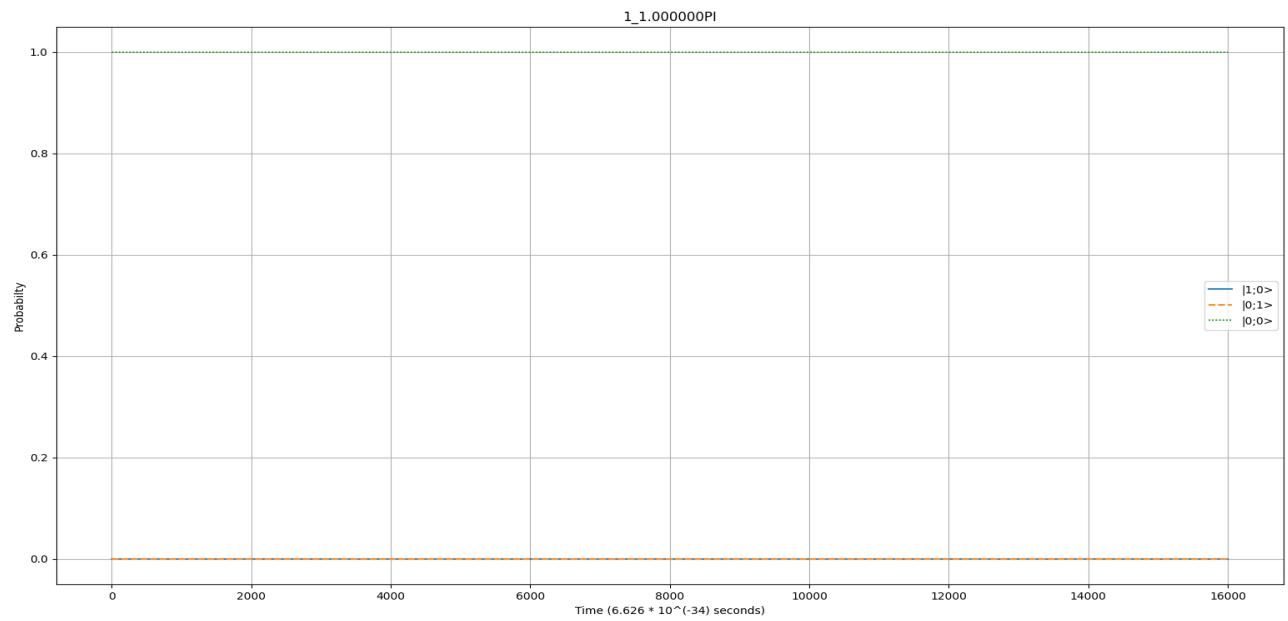


Рис. 34: Динамика в целевой полости.

Как видно на графике целевой полости (34), фотон в принципе в неё не попадает. Это происходит по той же причине, что и в тёмном состоянии: длина меняет фазу фотона при переходе. Волноводы из полости 0 в 1 и в 2 одинаковы, потому вероятности перехода частицы в них распределяются равномерно, а именно - состояние $|1; 0\rangle|0\rangle|0\rangle|0; 0\rangle$ переходит равномерно в состояния $|0; 0\rangle|1\rangle|0\rangle|0; 0\rangle$ (по волноводу из 0 в 1) и в $|0; 0\rangle|0\rangle|1\rangle|0; 0\rangle$ (по волноводу из 0 в 2). Дальше из этих состояний происходят переход в состояние $|0; 0\rangle|0\rangle|0\rangle|1; 0\rangle$, но волновод из 1 в 3 длины, по формуле интенсивность волновода ($\gamma_{ij} = |\gamma_{ij}| * e^{-i*\alpha*l}$) меняет знак нашего состояния. Из-за чего делаем вывод, что при переходе из 1 полости фотон приходит в состояние $|0; 0\rangle|0\rangle|0\rangle|1; 0\rangle$ с минусом, а из 2 с плюсом - в итоге, они взаимосо-кращаются.

При дальнейшем изменении длины волновода, наблюдаются замедления скорости передачи динамики, то есть один путь мешает другому.

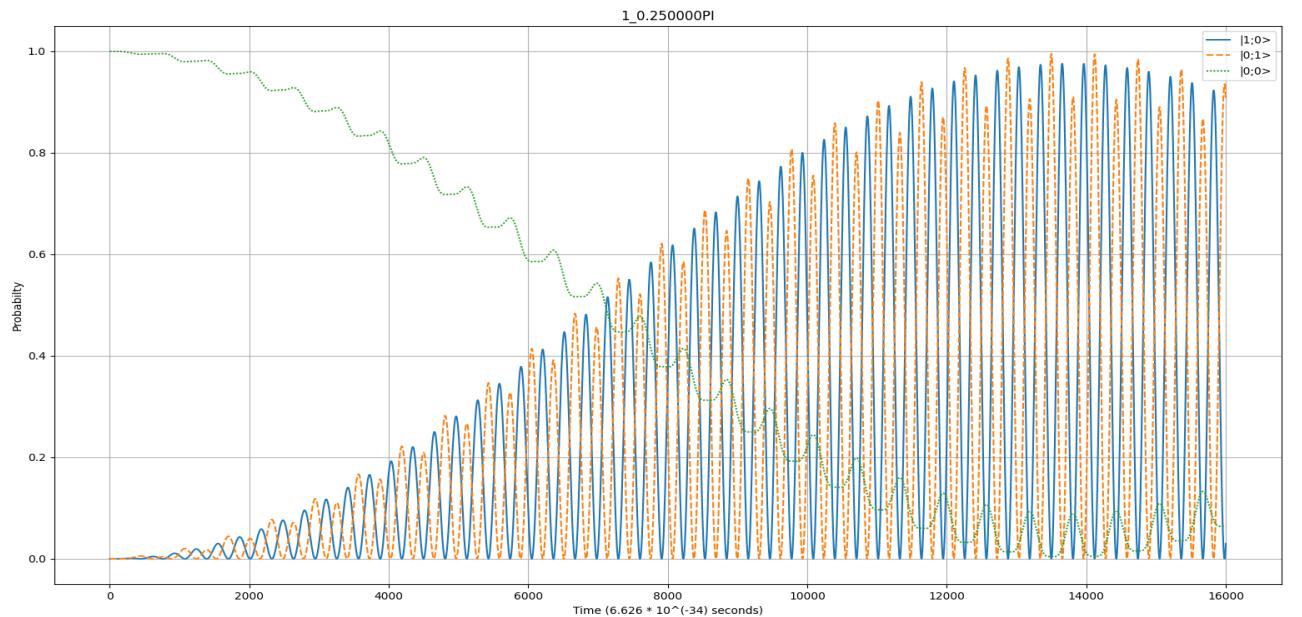


Рис. 35: Динамика в целевой полости. $l = \frac{\pi}{4}$

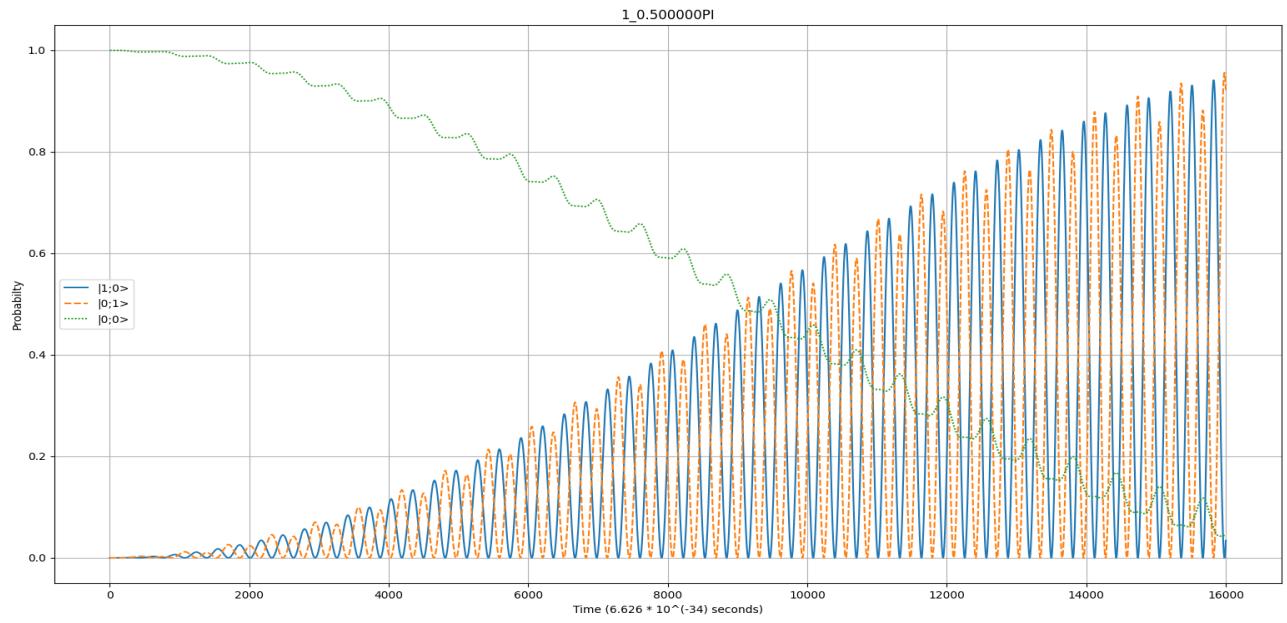


Рис. 36: Динамика в целевой полости. $l = \frac{\pi}{2}$

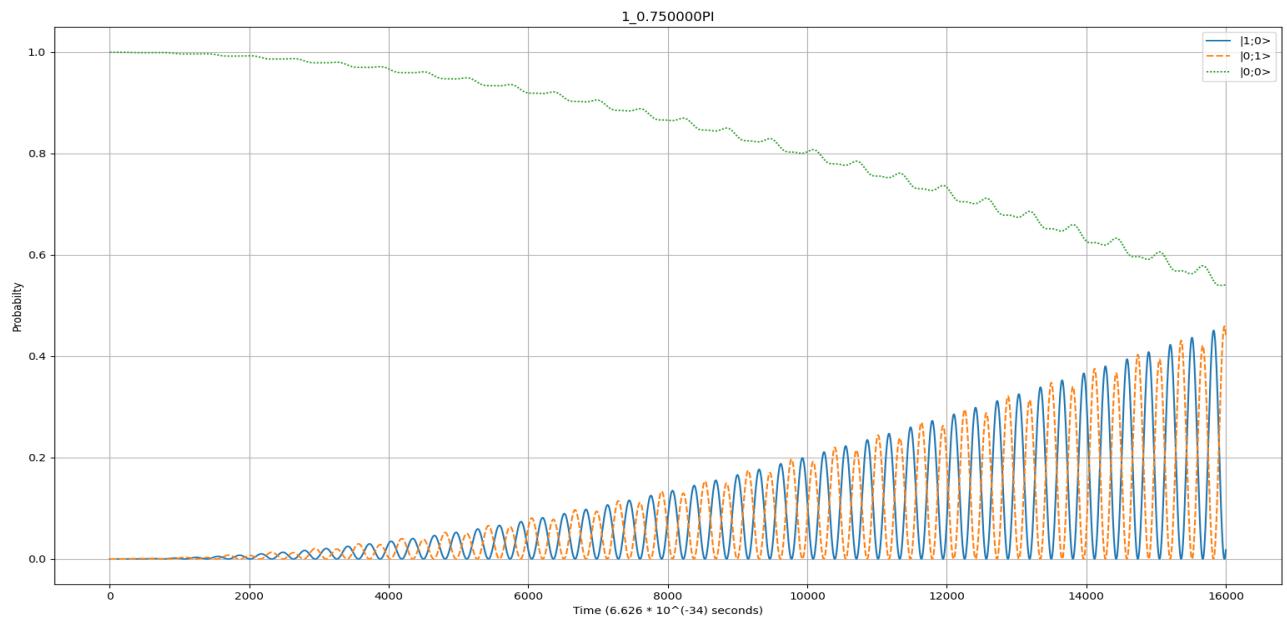


Рис. 37: Динамика в целевой полости. $l = \frac{3\pi}{4}$

В предыдущих главах мы видели, что от амплитуды зависит скорость передачи динамики, форма графа влияет на амплитуду динамики, и, собственно, также на скорость её передачи. Но вот при разных длин волноводов уже нет гарантии, что динамика может передаваться, так как при передаче ресурса из полости в полость может возникнуть такая ситуация, что некоторые компоненты состояния взаимосокращают друг друга в какой-то полости, из-за чего динамика дальше просто не передаётся.

Для **неустойчивой связи** результаты абсолютно аналогичные.

7 Заключение

В данной работе были исследованы зависимости процессов передачи динамики из полостей в другие полости в зависимости от параметров волноводов, форм графов и от самих сценариев.

Мы увидели, что от амплитуды волноводов зависит не только скорость передачи динамика, но и сама динамика. Но при этом неважно, как меняется динамика, даже в изменённом виде при одинаковых длинах она гарантировано будет передаваться.

При изменении форм графов мы увидели, что амплитуда динамики в целевой полости может уменьшаться, по сравнению с оригинальной полостью, так как она может из неё попросту утекать + мы определили зависимость амплитуды волноводов от числа путей из начальной полости в целевую

Наибольший интерес представляют разные длины в графе, так как, если при любых других параметрах динамика передаётся гарантировано, то это единственный параметр, из-за которого динамика может просто не доходить до целевой полости.

Конечно, модели в данной работе сильно упрощены, как с физической точки зрения, так и с математической, но они являются наиболее демонстративными и были проверены для более сложных процессов, которые не были добавлены в эту работу, из-за куда меньшей их наглядности.

Данная работа доказывает тот факт, что явление из микробиологии - передачи сложных сценариев, имеет место и в квантовой электродинамике, дальнейшие исследования можно провести для более специфичных ситуаций и сценариев, для исследования зависимости амплитуд волноводов для разных графов, что в свою очередь возможно как-нибудь применить к численным методам, в первую очередь к графикам. В моделировании данных процессов, в главе про форму графа было упомянуто про то, что динамика передвигается по кратчайшему пути, так же, как и реальный свет. Данная идея довольно привлекательна, особенно для задач, по типу коммивояжёра.

В работе использовалась написанная автором библиотека для квантовых вычислений [3], которая лежит в открытом доступе и доступна к установке. Исходники самих программ находятся [4].

8 Список литературы

- [1] Luc Montagnier, Electromagnetic signals are produced by aqueous nanostructures derived from bacterial DNA sequences, 2009, doi:10.1007/s12539-009-0036-7
- [2] Ю.И.Ожигов., Квантовый компьютер, 2020, - ISBN 978-5-317-06403-7
- [3] <https://github.com/KuzmaLine/QComputations>
- [4] <https://github.com/KuzmaLine/PCQED>
- [5] Ozhigov Y.I., Space of dark states in Tavis-Cummings model, 2019
- [6] Aspuru-Guzik A, Dutoi AD, Love PJ, Head-Gordon M. Simulated quantum computation of molecular energies. *Science*. 2005 Sep 9;309(5741):1704-7. doi: 10.1126/science.1113479. PMID: 16151006.
- [7] Кулагин Алексей Владимирович, Афанасьев Виталий Юрьевич, Ваньшунь Ли, Чжен Кэли, Мяо Хуэйхуэй, Плужников Иван, Ожигов Юрий Игоревич, Викторовна Надежда Борисовна. Химический квантовый компьютер, Ломоносовские чтения 2021
- [8] Vitaliy Afanasyev, Zheng Keli, Alexei Kulagin, Hui-hui Miao, Yuri Ozhigov, Wanshun Lee, On some modifications of finite-dimensional QED models, International conference QI2021

9 Пример программы для исследования формы графов для рабиевских осцилляций

```
#include <complex>
#include "QComputations_CPU_CLUSTER_NO_PLOTS.hpp"

double find_amplitude(double amplitude, size_t path_length, size_t count_paths) {
    return std::pow(amplitude / count_paths, double(1) / path_length);
}

std::string make_filename(const std::vector<size_t>& shapes) {
    return std::string(std::string("map_") + std::to_string(shapes[0]) + "_" +
        std::to_string(shapes[1]) + "_" + std::to_string(shapes[2]));
}

int main(int argc, char** argv) {
    using namespace QComputations;
    int world_size, rank;
    size_t atoms_count = 1;
    double amplitude = 0.001;
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &world_size);

    QConfig::instance().set_max_photons(atoms_count);
    std::vector<size_t> grid_config = {atoms_count};
    CHE_State state(grid_config);

    for (size_t i = 0; i < atoms_count; i++) {
        state.set_atom(1, i, 0);
    }
}
```

```

State<CHE_State> init_state(state);

int ctxt;
mpi::init_grid(ctxt);

H_TCH H(init_state);

auto time_vec = linspace(0, 1000, 1000);

auto probs = Evolution::schrodinger(init_state.fit_to_basis(H.get_basis()),
                                     H, time_vec);

if (rank == 0) {
    make_probs_files(H, probs, time_vec, H.get_basis(), "rabi_map/original",
                     rank);
}

// ----- graphs -----
std::vector<std::vector<size_t>> grid_configs =
{{atoms_count, atoms_count},
 {atoms_count, 0, atoms_count},
 {atoms_count, 0, 0, atoms_count},
 {atoms_count, 0, 0, atoms_count},
 {atoms_count, 0, 0,
  0, atoms_count, 0,
  0, 0},
 {atoms_count, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
  0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, atoms_count},
}

```

```

{atoms_count, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, atoms_count}};

std::vector<std::vector<size_t>> shapes = {{2, 1, 1},
                                              {3, 1, 1},
                                              {2, 2, 1},
                                              {4, 1, 1},
                                              {3, 3, 1},
                                              {3, 3, 3},
                                              {3, 3, 3}};

std::vector<size_t> target_cavity = {1, 2, 3, 3, 4, 26, 26};

std::vector<double> amplitudes = {amplitude,
                                   find_amplitude(amplitude, 2, 1) / 20,
                                   find_amplitude(amplitude, 2, 2) / 20,
                                   find_amplitude(amplitude, 3, 1) / 35,
                                   find_amplitude(amplitude, 2, 2) / 20,
                                   find_amplitude(amplitude, 3, 6) / 20,
                                   find_amplitude(amplitude, 3, 6) / 40};

std::vector<int> times = {16000, 16000, 16000, 16000, 64000, 16000, 16000};

for (size_t i = 0; i < shapes.size(); ++i) {
    auto time_vec = linspace(0, times[i], times[i]);
    auto new_amplitude = amplitudes[i];
    CHE_State new_state(grid_configs[i]);

    size_t start_cavity = 0;

```

```

if (i == 4) {
    start_cavity = 4;
}

for (size_t i = 0; i < atoms_count; i++) {
    new_state.set_atom(1, i, start_cavity);

}

new_state.reshape(shapes[i][0], shapes[i][1], shapes[i][2]);
new_state.set_waveguide(new_amplitude, 0);

if (i == 4) {
    new_state.set_waveguide(4, 7, 0, 0);
    new_state.set_waveguide(7, 4, 0, 0);
    new_state.set_waveguide(4, 5, 0, 0);
    new_state.set_waveguide(5, 4, 0, 0);
    new_state.set_waveguide(0, 8, find_amplitude(amplitude, 2, 2) / 20, 0);
}

std::string second;

if (i == shapes.size() - 1) {
    new_state.set_waveguide(0, 26, amplitude, 0);
    new_state.set_waveguide(26, 0, amplitude, 0);
    std::cout << new_state.get_gamma(0, 26) << std::endl;
    second = "_second";
}

State<CHE_State> new_init_state(new_state);

H_TCH H(new_init_state);

```

```

if (rank == 0) show_basis(H.get_basis());

H.show();

std::cout << new_amplitude << std::endl;

auto probs =
Evolution::schrodinger(new_init_state.fit_to_basis(H.get_basis()),
                        H, time_vec);

if (rank == 0) {
    make_probs_files(H, probs, time_vec, H.get_basis(), "rabi_map/" +
                      make_filename(shapes[i]) + second, rank);
}

auto p_0 = Evolution::probs_to_cavity_probs(probs, H.get_basis(), 0);
auto p_1 = Evolution::probs_to_cavity_probs(probs, H.get_basis(),
                                             target_cavity[i]);

make_probs_files(H, p_0.first, time_vec, p_0.second, "rabi_map/0_" +
                  make_filename(shapes[i]) + second, rank);
make_probs_files(H, p_1.first, time_vec, p_1.second, "rabi_map/" +
                  std::to_string(target_cavity[i]) + "_" +
                  make_filename(shapes[i]) + second, rank);

MPI_Finalize();

return 0;
}

```
