

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Projekt poświęcony jest analizie numerycznej równań różniczkowych w mechanice kwantowej. W szczególności, uwaga nasza będzie skupiona na równaniach w ujęciu semiklasycznym, gdzie bardzo mały parametr, $\varepsilon = \frac{\hbar}{2m}$ (\hbar -stała Plancka, m -masa cząsteczki), powoduje ekstremalnie wysokie oscylacje rozwiązania, a zatem istotne trudności w analizie numerycznej. Celem projektu jest rozwijanie teorii numerycznej aproksymacji dla równań w mechanice kwantowej oraz wykorzystanie tych wyników do badań w teorii sterowania optymalnego. Projekt podzielony jest na dwa pakiety:

1. RÓWNANIA MECHANIKI KWANTOWEJ. Nieliniowe równanie Schrödingera, Kleina–Gordona, Wignera, Pauliego i Diraca będą w centrum naszych zainteresowań. Będziemy poszukiwali odpowiednich metod o wysokim rzędzie zbieżności i możliwie niskiej złożoności obliczeniowej. Przedstawimy *analizę wydajności i kosztów* opracowanych metod, oraz porównamy je z innymi, powszechnie używanymi metodami.
2. TEORIA STEROWANIA OPTIMALNEGO W MECHANICE KWANTOWEJ. Nasze rozważania rozpoczniemy od układów mechaniki kwantowej modelowanych przez równanie Schrödingera. Opracowawszy metodologię dla innych równań z pierwszego pakietu przejdziemy do zagadnienia sterowania układów modelowanych przez te właśnie równania (Kleina–Gordona, Wignera, Pauliego itd).

Zagadnienia mechaniki kwantowej motywowane są pytaniami stawianymi w fizyce i chemii teoretycznej, a możliwość sterowania stanami atomów i cząstek za pomocą wiązki lasera zdecydowanie otwiera nowe perspektywy technologiczne. Rzadko kiedy równania te można rozwiązać analitycznie, dlatego uciekamy się do aproksymacji numerycznej rozwiązań, która jest niesłychanie trudnym zadaniem w obliczu ekstremalnie wysokich oscylacji i dość skromnych mocy obliczeniowych. Zaproponowana przez Richarda Feynmana w 1982 roku wizja komputerów kwantowych stosowanych do obliczeń w mechanice kwantowej, jako alternatywa dla klasycznych komputerów, jest rewolucyjnym pomysłem. Jednakże w rozwoju technologii komputerów kwantowych nie można uciec przed wykorzystaniem klasycznych komputerów, a zatem wysoko wydajnych metod numerycznych.

Problemy numeryczne w mechanice kwantowej są zatem nie tylko niebagatelne ale i potrzebne; z tego powodu rozwój tej dziedziny jest dynamiczny i przyciąga czołowych naukowców z zakresu fizyki, chemii i matematyki. W świetle wysokiej wydajności naszej metodologii pragniemy wyprowadzić podobne algorytmy dla innych równań mechaniki kwantowej oraz wdrożyć je do zastosowań w teorii optymalnego sterowania.

Projekt realizowany będzie we współpracy z Arieh Iserlesem (University of Cambridge, UK), rozpoznawalnym i cenionym w świecie ekspertem w zakresie nowoczesnej analizy numerycznej, jednym z liderów o imponującym zakresie wiedzy. Jesteśmy przekonani, że aktywność Arieh Iserlesa w polskim środowisku będzie owocna również dla polskiej nauki. Mamy nadzieję, że współpraca ta pomoże nawiązać polskim naukowcom nowe kontakty naukowe; zarówno ogólnopolskie jak i międzynarodowe.