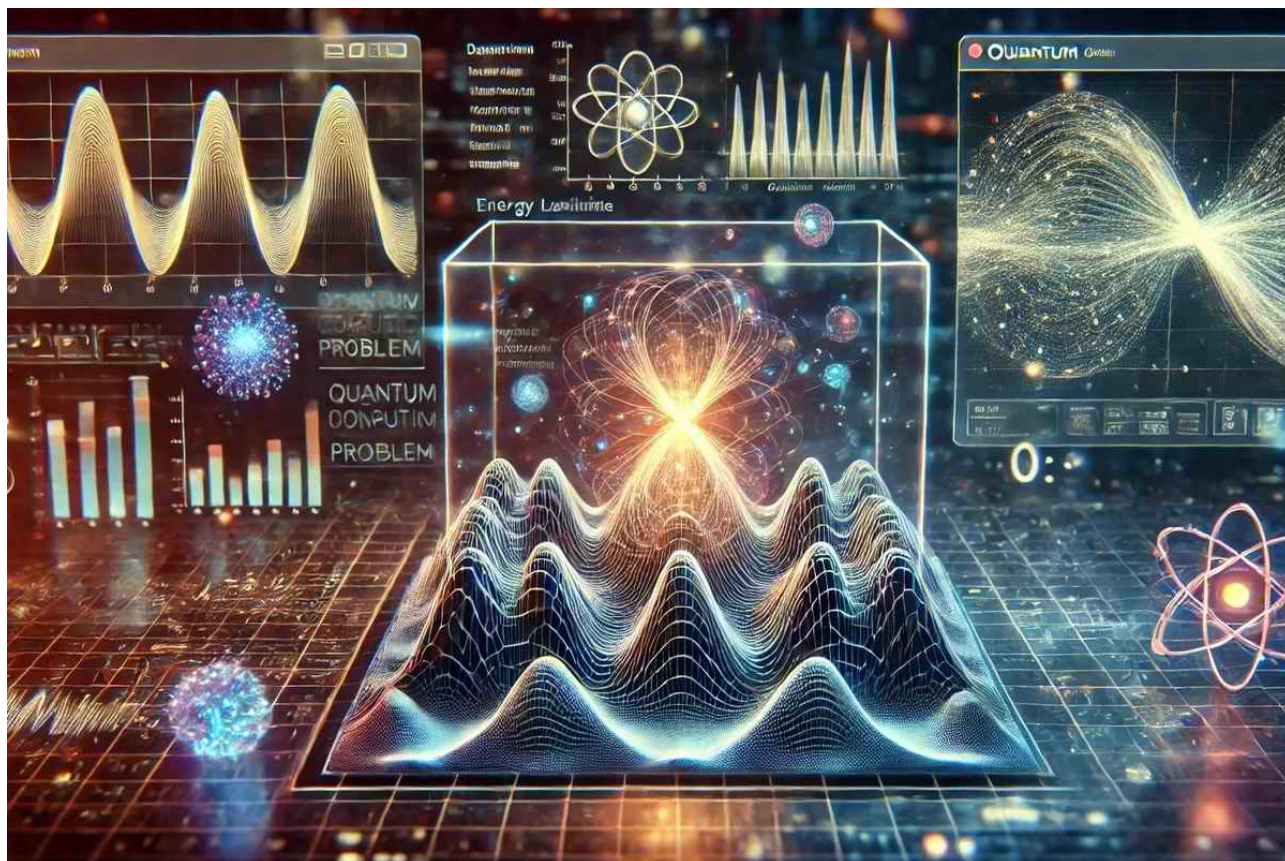


Как квантовые компьютеры решают сложные задачи оптимизации в физике многотельных систем



Дата публикации: 07.03.2025

Квантовые вычисления продолжают расширять границы возможного, демонстрируя преимущества в решении сложных задач, с которыми классические компьютеры сталкиваются на пределе своих возможностей. Одной из таких задач является поиск локальных минимумов в многотельных квантовых системах, что имеет огромное значение для понимания структуры материалов, молекулярных взаимодействий и физических процессов в наномасштабных системах. Исследователи показали, что квантовые **алгоритмы** способны находить эти минимумы быстрее и эффективнее, чем традиционные вычислительные методы.

Многотельные системы состоят из большого количества взаимодействующих квантовых частиц, таких как электроны в металлах или атомы в сложных молекулах. Одной из фундаментальных задач при их изучении является нахождение основного состояния — конфигурации с наименьшей энергией, в которой система стабилизируется. Однако в реальных условиях системы редко

достигают глобального минимума, а вместо этого «застревают» в локальных минимумах, представляющих собой состояния с относительно низкой энергией, но не на самом низком возможном уровне. Именно эти локальные минимумы во многих случаях оказываются критически важными, поскольку они определяют физические свойства материалов и динамику химических реакций.

Классические вычислительные методы, включая методы Монте-Карло и алгоритмы градиентного спуска, сталкиваются с серьезными затруднениями при решении этой задачи, поскольку сложность поиска локальных минимумов экспоненциально возрастает с числом частиц. Квантовые алгоритмы, использующие принципы суперпозиции и запутанности, способны обходить эти ограничения, моделируя естественные процессы охлаждения системы и эффективно находя локальные минимумы.

Исследователи разработали новый квантовый алгоритм, который имитирует поведение квантовой системы в термальной ванне — среде с фиксированной температурой, которая взаимодействует с системой и приводит к ее постепенному охлаждению. Этот процесс позволяет системе находить локальные минимумы, избегая вычислительных ловушек, характерных для классических методов.

Анализ показал, что поиск локальных минимумов является чрезвычайно сложной задачей для **классических компьютеров**, но для квантовых систем он оказывается гораздо проще. Исследователи доказали, что охлаждение квантовых систем до локальных минимумов является универсальным процессом, что подтверждает превосходство квантовых вычислений в задачах оптимизации.

Практическое применение этого метода выходит далеко за рамки фундаментальной физики. Оптимизация энергетических ландшафтов играет ключевую роль в материаловедении, где поиск оптимальных конфигураций атомов в новых материалах может привести к созданию сверхпроводников, наноструктур и квантовых устройств нового поколения. В химии этот метод может использоваться для прогнозирования реакционной способности молекул и дизайна новых лекарственных препаратов.

Квантовые алгоритмы также способны повысить эффективность решения сложных задач в инженерии, включая оптимизацию аэродинамических структур, распределение ресурсов и моделирование сложных систем. Возможность точного и быстрого нахождения локальных минимумов дает ученым и инженерам мощный инструмент для работы с задачами, которые ранее были недоступны для компьютерного моделирования.

Исследователи продолжат тестирование квантового алгоритма на

физических системах, стремясь выявить классы задач, в которых он может дать наибольшее преимущество. Следующим шагом станет проведение экспериментов с использованием квантовых процессоров нового поколения, чтобы проверить эффективность алгоритма на реальных квантовых устройствах.

Это исследование подчеркивает, что квантовые компьютеры способны не только решать фундаментальные задачи физики, но и открывать новые пути к созданию технологий будущего. Возможность управления энергетическими ландшафтами квантовых систем может привести к появлению инновационных методов проектирования материалов, улучшению эффективности химических реакций и созданию квантовых симуляторов, способных моделировать сложные системы с беспрецедентной точностью.

Ссылка: «Локальные минимумы в квантовых системах» DOI: [10.1038/s41567-025-02781-4](https://doi.org/10.1038/s41567-025-02781-4).