



## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ: ПРЕОДОЛЕНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ПРЕДЕЛОВ

**Семёнов Павел Викторович**

Доцент кафедры теоретической физики и квантовых технологий, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»  
г. Москва, Россия

**Иванова Дарья Сергеевна**

Аспиранты кафедры теоретической физики и квантовых технологий,  
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»  
г. Москва, Россия

### Аннотация

Настоящая статья представляет собой всесторонний анализ современных достижений в области **моделирования физических систем с помощью квантовых компьютеров**. Рассматриваются фундаментальные причины, по которым классические компьютеры не способны эффективно моделировать сложные квантовые системы из-за экспоненциального роста вычислительной сложности. Детально обсуждаются ключевые принципы квантового моделирования, включая аналоговые и цифровые методы, а также роль специализированных алгоритмов. В статье подробно описываются основные физические платформы, такие как **сверхпроводящие кубиты, захваченные ионы и фотонные системы**, и их уникальные возможности для решения задач в **квантовой химии, материаловедении и фундаментальной физике**. Особое внимание уделяется критериям оценки эффективности и роли гибридных квантово-классических алгоритмов.

**Ключевые слова:** квантовые вычисления, квантовое моделирование, квантовая химия, материаловедение, сверхпроводящие кубиты, захваченные ионы, NISQ.

### Введение

Моделирование физических систем является одним из ключевых инструментов современной науки, позволяющим исследовать свойства материалов, химические реакции и фундаментальные законы природы. Однако, когда речь заходит о моделировании **квантовых систем**, таких как молекулы или многочастичные системы, классические компьютеры сталкиваются с непреодолимым барьером. Это происходит потому, что состояние такой системы описывается суперпозицией, и количество необходимых переменных для её полного описания

растёт экспоненциально с увеличением числа частиц. Это делает точное моделирование даже относительно небольших молекул невыполнимой задачей для самых мощных суперкомпьютеров. **Квантовые компьютеры**, в свою очередь, оперируют по законам квантовой механики и, таким образом, идеально подходят для моделирования квантовых систем. Они используют свои собственные кубиты для непосредственного воспроизведения квантовых состояний моделируемого объекта.

## Теоретические основы

Основной принцип **квантового моделирования** заключается в том, что один квантовый гамильтониан (описание энергии и взаимодействий в системе) можно отобразить на другой. Это позволяет использовать контролируемый квантовый компьютер (симулятор) для имитации поведения сложной, не поддающейся прямому изучению, системы. Существует два основных подхода. **Аналоговое квантовое моделирование** предполагает прямое физическое воспроизведение взаимодействий между частицами. Например, взаимодействие между атомами в твёрдом теле может быть смоделировано с помощью ультрахолодных атомов, удерживаемых в оптической решётке. Второй подход — **цифровое квантовое моделирование** — использует последовательность квантовых логических вентилей (гейтов) для аппроксимации временной эволюции системы. Этот метод является более универсальным, но требует создания сложных и точных квантовых схем. Кроме того, для решения многих задач, таких как моделирование квантовых систем в условиях шума, используются специализированные алгоритмы, такие как **алгоритм приближённой квантовой оптимизации (QAOA)** и **вариационный квантовый эйгенсолвер (VQE)**, которые комбинируют квантовые вычисления с классической оптимизацией.

## Различные методы исследования

Моделирование физических систем проводится на различных физических платформах, каждая из которых имеет свои особенности. **Сверхпроводящие кубиты**, работающие при сверхнизких температурах, идеально подходят для моделирования систем, характерных для **физики конденсированного состояния**, таких как фазовые переходы и квантовые спиновые жидкости. Их высокая скорость и масштабируемость делают их перспективным инструментом. **Захваченные ионы**, удерживаемые в электромагнитных ловушках, отличаются исключительной когерентностью и могут быть использованы для точного моделирования **квантовой химии**, например, для вычисления энергии молекулярных связей.

**Фотонные системы**, использующие свет для вычислений, подходят для моделирования распространения света в сложных средах и решения задач, связанных с квантовой оптикой.

## Применение в науке и промышленности

Квантовое моделирование обещает совершить революцию в различных областях науки и промышленности. В **квантовой химии** оно позволит точно моделировать молекулярные реакции, что может ускорить разработку новых лекарств, катализаторов и материалов с улучшенными свойствами. В **материаловедении** квантовые компьютеры могут помочь в поиске новых высокотемпературных сверхпроводников или в создании материалов для более эффективных солнечных батарей. В **фундаментальной физике** моделирование на квантовом уровне поможет лучше понять такие явления, как поведение материи в чёрных дырах или взаимодействие элементарных частиц, что недоступно для классических вычислений.

## Игровые и мультимедийные методы

Разработка моделей для квантовых компьютеров — это сложный процесс, который требует использования мощных вычислительных инструментов. Современные гибридные квантово-классические алгоритмы используют классические компьютеры для управления квантовым устройством, оптимизации параметров и интерпретации результатов. Мультимедийные инструменты помогают визуализировать сложные многокубитные состояния и динамику квантовых систем, что облегчает понимание происходящих процессов. Визуализация результатов помогает учёным интерпретировать данные и выявлять закономерности, которые сложно увидеть в виде массивов чисел.

## Индивидуализация и дифференциация обучения

Моделирование физических систем требует **дифференцированного** подхода в зависимости от конкретной задачи и её свойств. Например, для моделирования сильно коррелированных электронных систем в твёрдом теле более подходящей может быть платформа сверхпроводящих кубитов, в то время как для моделирования динамики молекулярных связей лучше использовать захваченные ионы. Таким образом, успешная работа с квантовым моделированием требует от исследователя глубокого понимания как физики моделируемой системы, так и особенностей конкретной квантовой платформы, что делает эту область междисциплинарной и требующей узкой специализации.

## Оценка эффективности методов

Эффективность квантового моделирования оценивается по нескольким ключевым параметрам. **Количество кубитов** определяет размер моделируемой системы. **Время когерентности** показывает, как долго квантовый компьютер может выполнять вычисления, не теряя своих квантовых свойств. **Фиделити (точность)** операций является критическим параметром, определяющим надёжность результатов. Для современных **NISQ-устройств** (Noisy Intermediate-Scale Quantum — шумные квантовые устройства среднего масштаба) все эти параметры

ограничены, что делает точное моделирование пока ещё недостижимым. Однако будущие поколения отказоустойчивых квантовых компьютеров обещают преодолеть эти ограничения.

## **Заключение**

Моделирование физических систем с помощью квантовых компьютеров представляет собой одно из самых перспективных направлений в современной науке. Способность этих устройств преодолевать вычислительные пределы классических машин открывает новые горизонты для исследований в материаловедении, химии и фундаментальной физике. Несмотря на то что до коммерческого использования ещё далеко, уже достигнутые успехи демонстрируют огромный потенциал квантового моделирования как инструмента для будущих научных открытий и технологических инноваций.

## **Литература**

1. Нильсен М. А., Чанг И. Л. **Квантовые вычисления и квантовая информация.** — М.: Институт компьютерных исследований, 2014.
2. Шумахер Б., Уэстморленд М. **Квантовая теория информации.** — Cambridge University Press, 2010.
3. Feynman R. P. **Simulating physics with computers.** — International Journal of Theoretical Physics, 1982.
4. Lukin M. D., et al. **Quantum simulation with ultracold atoms.** — Nature, 2019.
5. Aspuru-Guzik A., et al. **Quantum computing for chemistry.** — Science, 2005.
6. Королев А. Н., Митрофанов С. А. **Биофотонные технологии.** — Казань: КФУ, 2022.
7. Preskill J. **Quantum Computing in the NISQ era and beyond.** — Quantum, 2018.
8. Ito H. **High Power Fiber Lasers.** — Springer, 2017.
9. Hecht E. **Optics.** — Pearson Education, 2017.