Суперкомпьютерное моделирование квантовых блужданий для решения сложных вычислительных задач

С.В. Борзунов, С.Д. Кургалин, А.В. Романов, **К.О. Петрищев**

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»

Дубна – 2026

Введение

Модель квантовых блужданий на графах является универсальной моделью вычислений, эквивалентной широко известным подходам, основанным на квантовых схемах и адиабатических расчетах. Аналогично случаю классических случайных блужданий, квантовая система подчинена в этой модели определенному закону изменения состояния во времени, причем набор состояний отождествляется с множеством вершин некоторого графа, конечного или бесконечного.

В настоящей работе создан **комплекс программ для моделирования квантовых блужданий на графах различной топологии**, ориентированный на использование на высокопроизводительных вычислительных комплексах.



Особенности квантовых блужданий

Квантовое блуждание демонстрирует особенности, резко отличающие этот процесс от аналогичной классической задачи. В частности, за счет проявления суперпозиции состояний время достижения определенной вершины графа может быть значительно меньшим, чем при случайном блуждании классической частицы. Этим обеспечивается **полиномиальное ускорение работы квантовых алгоритмов** по сравнению с классическими в таких практически значимых задачах как поиск на ориентированных или неориентированных графах, при нахождении треугольника в графе, в задачах оптимизации т. д.

Волновая функция системы:

$$|\psi\rangle = \sum_{q\in\{0,1\}} \sum_{x=-\infty}^{\infty} c_{q,x} \, |q\rangle \, |x\rangle \, ,$$

где $c_{q,x}$ — комплексные коэффициенты, q — внутреннее состояние, x — координата на оси. Оператор смещения и волновая функция после выполнения n шагов:

$$S = |0\rangle \langle 0| \otimes \sum_{x=-\infty}^{\infty} |x+1\rangle \, |x\rangle + |1\rangle \langle 1| \otimes \sum_{x=-\infty}^{\infty} |x-1\rangle \, |x\rangle \, ,$$

$$|\psi_n\rangle = U^n \, |\psi_0\rangle = [S(H \otimes I)]^n \, |\psi_0\rangle \, .$$

Моделирование квантовых блужданий

В работе рассматривается движение частицы по прямой, циклу и гиперкубу. Алгоритм квантовых блужданий реализован с помощью параллельных вычислений в рамках стандарта MPI. Использованы библиотеки mpi4py и NumPy для высокопроизводительных операций над комплексными массивами, Matplotlib – для визуализации данных, а также стандартные библиотеки Python для работы с файловой системой, сохранения результатов в csv-формате и измерения времени выполнения.

После инициализации MPI-среды каждый процесс получает идентификатор (rank) и общее количество процессов (size). При наличии поддержки платформы программа автоматически использует расширенную точность (complex256, float128) для уменьшения накопления ошибок, в противном случае – стандартную двойную точность (complex128, float64). Затем выполняется разбиение графа на непрерывные участки, закрепленные за отдельными процессами, что снижает объем используемой памяти и повышает масштабируемость.

Моделирование квантовых блужданий

Для моделирования используются два массива комплексных амплитуд, соответствующих внутренним состояниям квантовой частицы. Начальное состояние локализовано в выбранной вершине. После этого функция MPI.Barrier обеспечивает одновременный старт вычислений. На каждом шаге основного цикла выполняются: обмен граничными значениями между соседними процессами через неблокирующую функцию MPI.Sendrecv; применение оператора изменения внутреннего состояния, пространственный сдвиг.

Вычисляемые вероятности сохраняются в массиве для получения распределения вероятностей. Для компенсации накопления вычислительной ошибки через заданное число шагов выполняется глобальная перенормировка: норма состояния вычисляется коллективной операцией MPI.Allreduce, затем амплитуды масштабируются.

Программа

По завершении локальные распределения собираются на главном процессе (rank = 0) операцией MPI.Gatherv. В csv-файле сохраняются вероятности для всех узлов и аналитическое распределение; дополнительно ведется журнал с параметрами моделирования и временем выполнения. Для визуального анализа автоматически строятся графики.

Программа построена по модульному принципу: отдельно реализованы модули параллельного распределения данных, квантовой эволюции, перенормировки, сохранения результатов и визуализации. Модульная архитектура позволяет расширять комплекс без изменения вычислительного ядра – реализовывать другие типы квантовых монет, моделировать блуждания на произвольных графах, добавлять GPU-ускорение и переносить программу на гибридные высокопроизводительные системы.

Результаты численных расчетов. Числовая ось

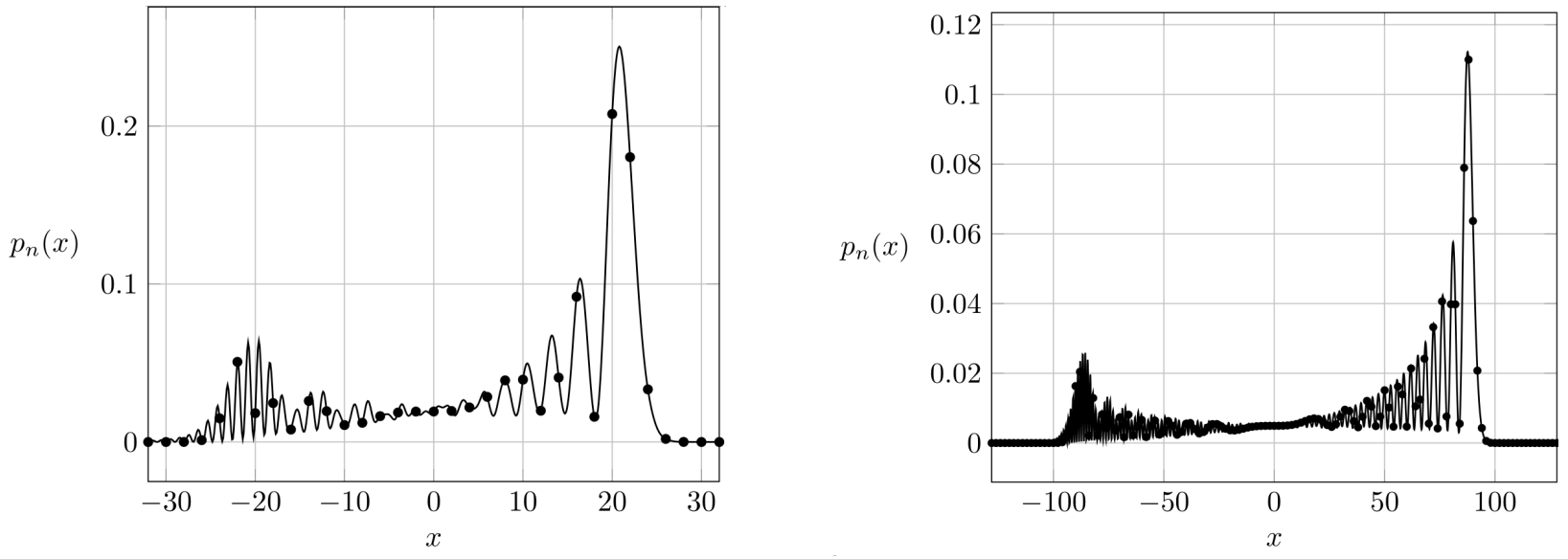

Рис. 1. Распределение вероятностей пребывания частицы, совершающей квантовое блуждание по числовой оси, в точке x для моментов времени n = 32 (левая панель), n = 128 (правая панель). Изображены только ненулевые вероятности при четных значений $x+n$. Начальное состояние системы $|0\rangle\otimes|0\rangle$

Результаты численных расчетов. Цикл

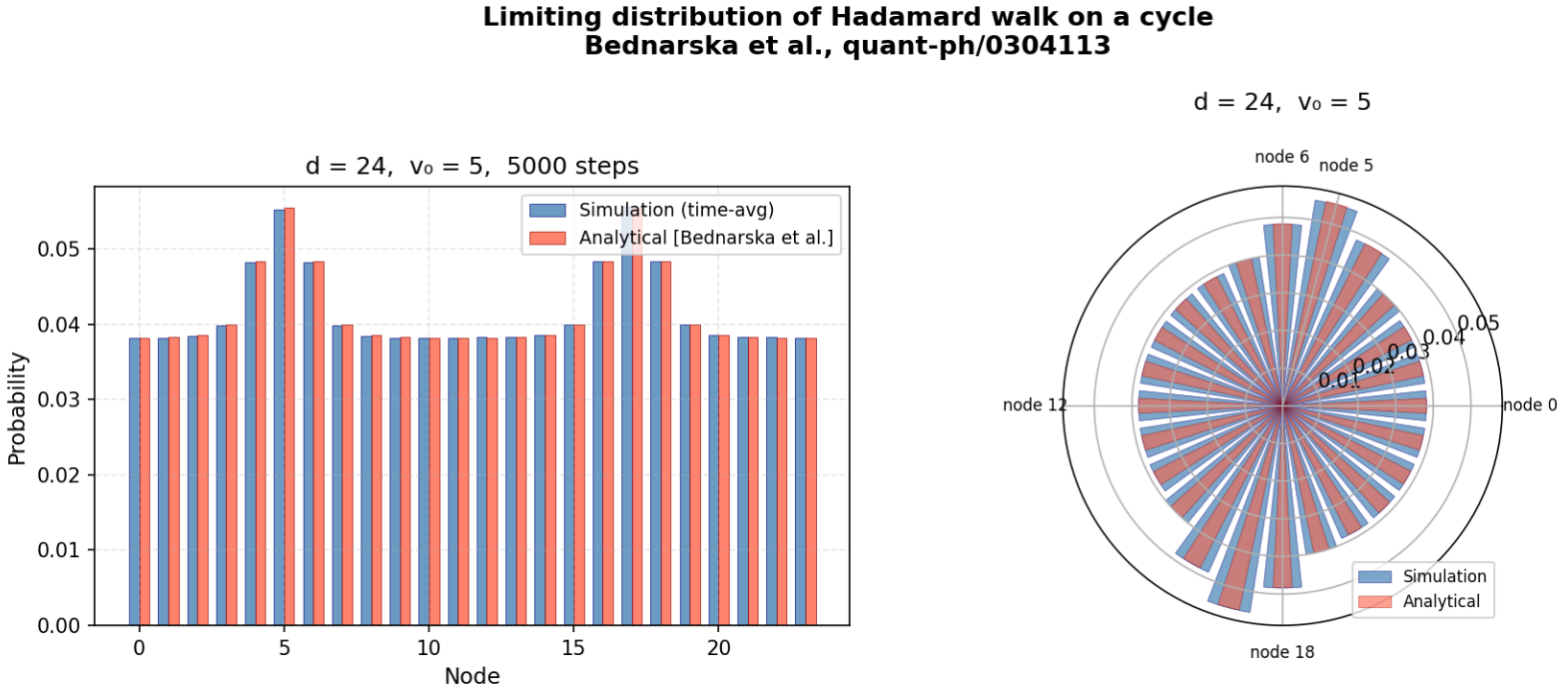

Рис. 2. Распределение вероятностей пребывания частицы, совершающей квантовое блуждание по *n*-циклу, *n*=24. Начальное состояние системы $|0\rangle\otimes|5\rangle$

Результаты численных расчетов. Гиперкуб

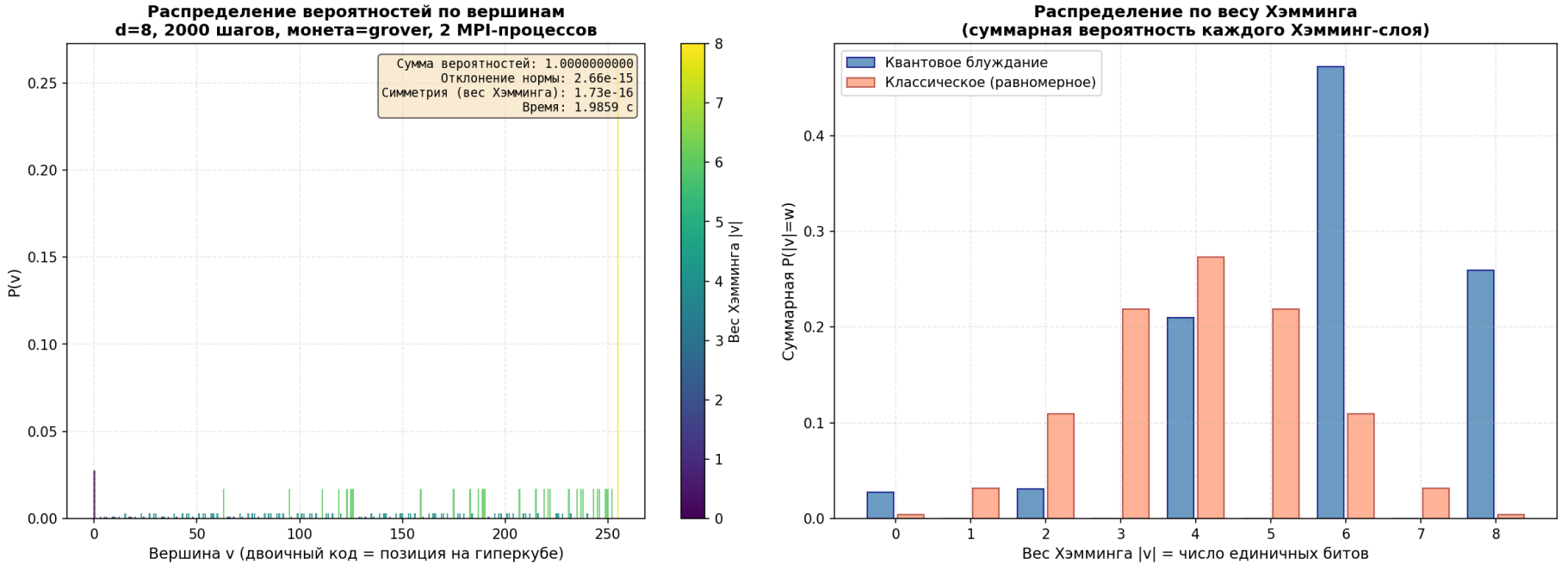

Рис. 3. Распределение вероятностей пребывания частицы, совершающей квантовое блуждание по гиперкубу, d=8

Результаты численных расчетов

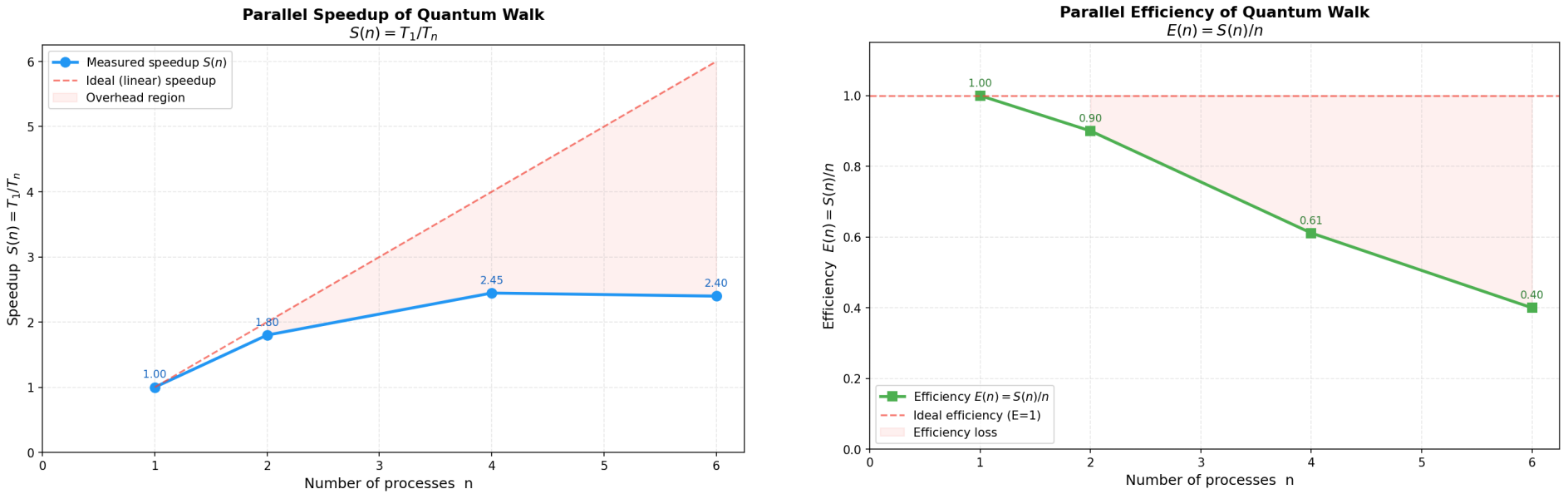

Рис. 4. Ускорение вычислений по сравнению с последовательным алгоритмом (левая панель) и эффективность параллельных вычислений (правая панель)

Применение

Модель квантовых блужданий ранее была успешно применена в ряде теоретических работ по физической химии, позволив получить результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными. В частности, модель позволяет исследовать химические реакции, идущие по радикальному механизму, или предсказать результат, анализируя граф, построенный из отдельных стадий физико-химического процесса. Отдельно стоит отметить возможность **анализа химических реакций** на основе рельефа поверхности потенциальной энергии, где частицы движутся из одного минимума в другой, следуя рельефу потенциальной энергии системы.

В качестве области применения результатов математического моделирования следует отметить и такую задачу, как моделирование диффузионных процессов на поверхности и в объеме твердой фазы. Традиционное моделирование методами классической молекулярной динамики требует значительных мощностей и времени. Другим серьезным ограничением являются межатомные потенциалы, конструирование которых даже при использовании современных инструментов машинного обучения остается весьма трудоемким процессом и в значительной степени тормозит исследования.

В случае квантовых блужданий можно, например, обойтись результатами, полученными из **сканирования поверхностей потенциальных энергий**, дающими исчерпывающее представление о процессе в локальной области, ограниченной несколькими десятками или сотнями атомов. Для простых адсорбатов, таких как атомы водорода, азота или кислорода, это позволит существенно ускорить моделирование диффузионных процессов, являющихся важным этапом **каталитических реакций** в промышленном химическом синтезе, а также играющих значительную роль в разработке материалов для энергетики будущего.

Заключение

Проведенные вычислительные эксперименты продемонстрировали существенное ускорение получения результатов по сравнению с непосредственным расчетом в однопроцессорном режиме.

Работа является продолжением цикла исследований физических и физико-химических процессов, проводимых с использованием суперкомпьютерного моделирования в Суперкомпьютерном центре Воронежского государственного университета.



Спасибо за внимание!

