

Symulacje układów fizycznych za pomocą technologii wyżarzania niedalekiej przyszłości

Bartłomiej Gardas

*Institut Informatyki Teoretycznej i Stosowanej Polskiej Akademii Nauk
ul. Bałtycka 5, 44-100 Gliwice*

Nowoczesna technologia, skoncentrowana wokół wyżarzaczy kwantowych, ponad rozwiązanie “trudnych” problemów optymalizacji, obiecuje chociażby uutorowanie drogi dla *wydajnych* symulacji układów fizycznych. Idea ta zawsze była “świętym gralem” współczesnej fizyki i prawdopodobnie nadal jest jednym z najbardziej ekscytujących przedsięwzięć w obecnych czasach. Efekty jej wykorzystanie mogą bowiem wpłynąć, także na rozwiązanie wielu problemów życia codziennego dotyczących na przykład badania i rozwój leków, logistyki łańcucha dostaw, finansów, szyfrowanie i cyberbezpieczeństwo.

W ramach projektu proponujemy eksplorację idei, skupionych wokół *ogólnych* urządzeń komputerowych, inspirowanych wyżarzaniem oraz ocenę ich użyteczności w symulowaniu systemów fizycznych, zwłaszcza modeli oddziałujących kubitów w *niedalekiej* przyszłości. Skupimy się na dwóch **kluczowych pomysłach**, które stanowią trzon nieniejszego projektu:

- P1.** Znalezienie nowych algorytmów, które mogą być wspomagane przez wyżarzacze klasyczne i kwantowe niedalekiej przyszłości do symulacji dynamiki zakodowanej w instancjach tzw. szkieł spinowych.
- P2.** Opracowanie klasycznych algorytmów opartych na metodach wykorzystujących sieci tensorowe, (impulsowe) sieci neuronowe oraz metodach inspirowanych algorytmami Monte Carlo w celu określenia struktury niskoenergetycznego widma problemów szkieł spinowych.

Pomysły te oparte zostały na trzech **zadaniach badawczych**, które zostaną wykonane w ramach projektu:

- Z1.** Przeprowadzenie eksperymentów dotyczących równoległych w czasie symulacji układów fizycznych kilkuciałowych na wyżarzaczach.
- Z2.** Eksperymentalnie symulowanie dynamiki układów wielociałowych poprzez próbkowanie statystyczne za pomocą wyżarzaczy.
- Z3.** Numerycznie emulowanie i weryfikacja technologii wyżarzania niedalekiej przyszłości z wykorzystaniem sieci tensorowych i neuronowych.

Ponadto zidentyfikujemy układy fizyczne możliwe do zasymulowania przy użyciu technologii dostępnej obecnie lub w najbliższej przyszłości. Kluczowym zadaniem będzie zademonstrowanie koncepcji obejmujących teorię, eksperymenty i symulacje komputerowe. Nasze cele będą dotyczyć głównie walidacji nowo wyłaniającej się technologii wyżarzania i określenia możliwości jej potencjalnych zastosowań w symulacjach fizycznych. Ponieważ nawet małe układy fizyczne mogą wykazywać bogatą dynamikę, np. nagłą śmierć i wskrzeszenie splątania, zaproponujemy potencjalnych kandydatów na tzw. “trudne” instancje, służące głównie do *testowania* ograniczenia technologii wyżarzania niedalekiej przyszłości.

Dodatkowo stworzymy platformę do emulacji i oceny różnych urządzeń do wyżarzania przy użyciu najnowocześniejszych metod. Taka otwarta biblioteka będzie mogła być wykorzystywana do rozwiązywania m. in. problemów optymalizacji pojawiających się w różnych dyscyplinach naukowych i badaniach przemysłowych.