

●当下,量子计算在先进材料以及生物化学模拟方面正崭露头角。因为量子力学解释了这些材料的基本物理特性,量子计算非常适合进行模拟。
●那么,什么是量子模拟?量子模拟有什么用处?它将在科研领域带来哪些突破?请看本期解读——

“走近”量子模拟

■张媛 张远达 平

高技术前沿

谈谈基本概念

作家刘慈欣在小说《镜子》中,提到一种无限运算的计算机:只要给定每个粒子初始条件,它可模拟各种演化过程,整个宇宙会像从镜子中看到的一样被复制。比如建一个鸡蛋模型,就能孵化出跟现实小鸡一根毛都不差的虚拟小鸡。这个计算过程,就可近似看作量子模拟。

这里所说的模拟,是构建一个与原问题本质相似又更容易研究的模型系统,可按相同规律加以演化。有一个能直观说明“模拟”的例子,就是风洞实验——通过控制气流以模拟自然环境中真实的气流运动状况,在设计飞机时将飞机模型固定在风洞中反复吹风,观察、测量气流对其的作用,从而不用让飞机飞到天上进行实验,就能得到相关的飞行数据。

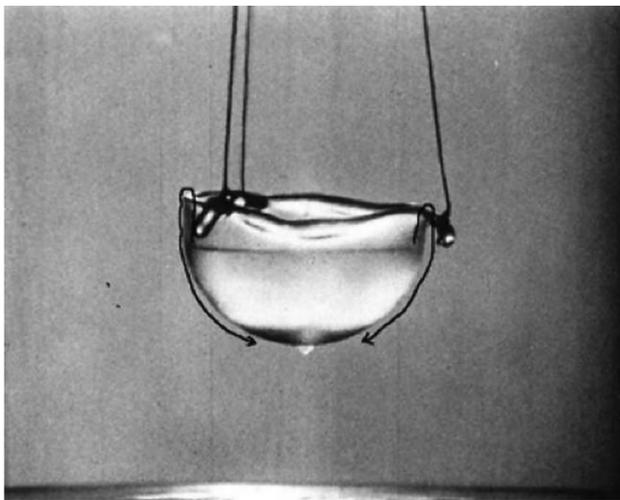
量子模拟,顾名思义就是运用量子力学的基本规律来构建模拟系统。有人可能会问,既然制造飞机、汽车,包括进行核试验等,都已在超强的经典计算机上模拟,为何还要再去研究量子模拟呢?原因就在于,与宏观世界不同,组成量子系统的都是微观粒子,它们遵守的是描述微观世界物理规律的量子力学。大量这样的微观粒子组成了量子多体系统,其性质和行为就是量子多体问题。比如高温超导的机制,宇宙在诞生初期的演化等。

在量子多体问题中,随着粒子数增加,计算所需资源将呈指数级增长,并伴随开放性系统的求解难度等,遵循宏观世界原理的经典计算机基于数值模拟的方法,遇到这类问题就会变得“无所适从”,对于大系统的演化无法精确求解。而且,现实世界的物理系统太过复杂,很多问题因为计算耗时太久,最终也会表现为无解。

一种重要手段

美国物理学家理查德·费曼最早意识到了这方面的问题,既然量子力学是支配世界的底层物理规律之一,那么就需要人造一个符合量子规律的系统,通过精确控制这个人工系统,去模拟一些在现实条件下难以操控的宇宙和自然界的复杂量子系统及经典现象,从而为发现普适的物理规律提供思路和验证。这就是量子计算机诞生的初衷和目标,在原问题上赋予了模拟方法以得天独厚的优势。

在自然界中,量子系统就像一个有无数岔路口的巨大迷宫,或者像一个巨型黑箱,物质a和物质b进去之后就出来物质c,而迷宫或者黑箱里到底发生了什么?每个原子、分子到底经历了什么?这是一团难解的科学之谜。量子系统的演化很难被人控制和改变,所以人们长期以来都不能系统地探知不同参数下的量子动力学性质。



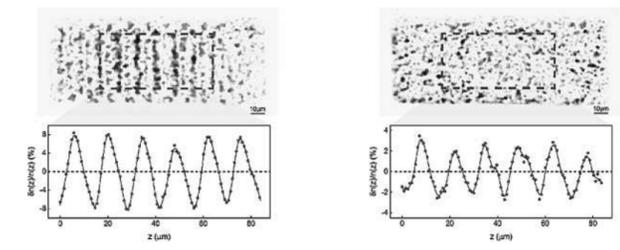
该图所显示的是能沿杯壁向上“爬”的液氦超流。

量子计算机的量子模拟,是研究量子动力学行为的理想方法。特别是利用量子计算机,不同的量子动力学行为能通过调节参数实现,并可多次重复,从而从多个角度来探索其性质。

在量子力学中,有一个主导量子系统性质和演化的重要物理量,叫作“哈密顿量”。如果两个量子多体系统的“哈密顿量”别无二致,一旦摸清其中一个,就可像照镜子一样知晓另一个。

以药物研发为例。目前,认为阿尔兹海默症的元凶是大脑中错误折叠的蛋白质,要想找到合适的药物,就得模拟不同药物对不同蛋白质所起的作用。量子模拟就可帮助科学家计算大量潜在的蛋白质折叠序列,迅速找到有用的药物。

再比如,想要研究固体材料中高温超导的机制,为什么不能直接去测高温超导材料呢?因为电子“看不见”;首先在空间上,固体晶格尺度是纳米,而光的波长是百纳米,固体材料里发生的事情我们难以知晓;其次在时间上,电子的动力学时间尺度非常小,电子学器件的响应“跟不上”。所以人们猜测,“电子相互作用”在高温超导中扮演了重要角色。但现有的凝聚态实验手段,主要是测量宏观数量电子的集体输运行为,量子相干性、量子动力学过程都很难测到。对此,量子模拟就提供了一种重要手段:用光晶格中的冷原子,模拟固体晶格中的电子。这对于理解高温超导



强相互作用费米超流的第一声波(左图)与第二声波(右图)的信号。

的物理原理、设计超导材料,提供了巨大帮助。

神秘的“第二声”

在自然界中,微观粒子可分为费米子、玻色子两类。质子、电子都属于费米子,氦-4、钠原子都属于玻色子。两种不完全相同的费米子,组成的多体系统有着丰富多彩的物理现象,其中就包括此次潘建伟院士团队采用量子模拟手段研究的对象——强相互作用费米超流。

扩散和波动是自然界随处可见的现象。比如,向一杯清水中滴一滴墨水,就会发生扩散;滔天海浪、车水马龙的噪声等,这些都是波动。而对于热量,通常情况下,是从近到远逐渐扩散传播的。在某些情况下,热量还可像声音一样以波的形式传播。这一现象,被称为“第二声”。

神秘的“第二声”只会出现在某些特殊物质中,例如液氦超流。什么是超流?超流就是黏滞性变为0的流体。比如我们搅动一杯水时,漩涡会因为黏滞性渐渐恢复平静,超流中的漩涡却不会停止,反而会自个“爬”到杯子外去。此外,超流还有很多神奇特性,比如拥有极高的热导率,能产生量化的涡旋晶格等。它与超导都是如今物理学研究的前沿。

上世纪40年代,苏联著名物理学家

朗道通过两流体模型,从宏观上解释了液氦-4的超流现象,并预言了“温度将以波的形式在超流中传播”,同时将其命名为“第二声”。然而,80多年过去了,科学家们虽前赴后继,仍难以在液氦体系中探测到动力学超流理论的关键参数。所以,“第二声”现象的研究并未得到实质性进展。

超冷原子的出现,为研究“第二声”的衰减带来了新机遇。2005年,科学家终于确认了超冷强相互作用费米气体的确存在超流现象。直到2013年,科学家才首次在该体系观测到了“第二声”的存在。

“第二声”实在太微弱了。对“第二声”衰减的观测,长期受到两个瓶颈问题制约:一是要有高品质的费米超流,近5年来,密度均匀的强相互作用费米超流才被制备出来;二是“第二声”对实验装置的要求极为苛刻,超冷原子的温度本身已接近绝对零度,只比绝对零度高千万分之一摄氏度,测温非常困难。而观测“第二声”则要探测温度波动所伴随的微小物质密度波动,在毫厘之间寻找细微变化,更是难上加难。

借助量子模拟,对“第二声”的研究终于取得了突破性进展。

奏响上升旋律

近期,中国科学技术大学潘建伟院士团队与澳大利亚科学家合作,首次在处于强相互作用极限下的费米超流中测得“第二声”的衰减率,该成果在2月4日国际学术期刊《科学》上发表。2月10日《自然》杂志又在线发表潘建伟院士团队与国内相关科研团队合作,在基于超冷原子分子的量子模拟方面取得的重要进展。

对费米超流的破译,像破译了一个物理参数密码本一样,使我们有望揭开浩瀚宇宙中无法触及的谜团。比如密度仅次于黑洞的中子星,其地壳就是一个强相互作用费米超流系统。此外,宇宙大爆炸后的数秒内,宇宙中充斥的极高温度夸克-胶子等离子体,也可视为强相互作用费米超流。

我们一旦洞悉了费米超流的性质,就能对另外两个系统也有深入了解。中子星可望而不可即,夸克-胶子等离子体的制备又异常困难昂贵,超冷强相互作用费米超流则成为我们解开未解难题的一把“钥匙”。

通过量子模拟,科学家可在化学、生物、信息等多个领域创造全新契机。比如研发新型电池、制备多样的催化剂、探究新制药、开发新材料、探索化学分子结构及量子精密测量等。

正如晶体管是计算机的基础,激光技术支撑了现代互联网,导航技术的发展离不开原子钟等精密测量技术的支撑……量子力学的建立也在推动着现代信息技术发展。

几十年间,对量子规律的被动观测,到对量子规律的宏观体现和应用,再到对单个粒子主动制备、精确测量及主动调控操纵,进而利用量子规律认识和改造世界,量子科技领域正奏响一段段不断上升的旋律。

【开栏的话】

“任何人都得承认实验是科学之母。”科技强国、科技强军,离不开一流的国家和军队实验室建设。本版从今日起,推出“走进重点实验室”

专栏,让广大读者近距离“参观”国家和军队部分重点实验室,从中感受我国我军新时代的科技脉动。敬请关注!

走进重点实验室

多色队标密布,海量数据流转,一图尽览敌我……近日,陆军指挥学院中级指挥培训班组织了一场基于数字空间的红蓝对抗演练,让参训学员仿佛置身于真实的战场。促成这场“云上对决”的幕后“智囊”,则是该院的重点打造的科研机构——作战实验室。

“如何对作战方案、作战效能进行精确评估?”“如何衡量战斗指令的最优选项?”谈及建立作战实验室的初衷,该院领导介绍,现代体系练兵,必须善于发挥数字化优势,开辟精准高效的科技练兵新境界。

副教授韩冰告诉记者,着眼新型陆军作战样式,他们围绕红蓝对抗的态势理解、指挥决策、行动控制等方面展开研究,通过军事设计、模型构建、代码编写等,建立了一套“陆军合成部队作战方案推演评估系统”。这正是作战实验室的“大脑”。

走进作战实验室的推演教室,映入眼帘的是一面巨幅电子屏,三维态势图逼真还原演习地域情况。置身推演席,一股浓烈的实战味扑面而来;不同的作战方案录入系统后,推演每进行一步,部队的突击速度、火力毁伤、弹药消耗等数据,便会实时更新呈现在屏幕上;基于作战标准的评估分析几乎同步推出,参演人员对拟订方案的优劣一目了然。

韩冰说,该系统综合运用静态分析比对、规则判定分析以及仿真推演分析等方法,对作战方案及各类作战计划的完整性、合理性以及预期效益进行实验评估,为指挥员定下战斗决心提供了科学依据。

此外,结合作战样式的发展变化,他们针对智能化、无人化作战行动特征,建立了不同的评估模型、评估指标,推动作战方案不断向实战靠拢。

“从毁伤效果评估的数据来分析,信火突击阶段并未达到预期效果,主要原因在于……”相较于第一案,将开进展开地域配置在3号高地,更有利于发挥空地火力优势……”采访间隙,该院某学员队组织的一场网上推演,让作战实验室“硝烟再起”。记者在现场看到,与过去相比,作战评估更加实时精准,通过基于实验数据支撑的定量、定性分析,倒逼学员用实战思维参与推演,真正达到了“打一仗、进一步”的实践教学效果。

除了实现决策评估,作战实验室还可为部队体制编制调整和兵力配属提供重要的数据支撑。科研人员根据

开辟科技练兵新境界

陆军指挥学院作战实验室

■熊东旭 本报记者 韩成

各战略方向使命任务和战场环境,通过仿真分析评估任务部队编制能力指标,采取定量和定性相结合的方式,精准换算出不同任务方向部队的兵力编制标准和火力分配。

近年来,从“跨越”系列演习到全军重大作战指挥集训,该学院作战实验室先后为数十场演训活动提供作战实验平台支撑,先后获军队级以上科技进步奖20多项,有效保障和服务了院校教学、部队指挥参谋人员训练。

以战研教,为战育人。聚焦转型发展,该学院作战实验室不断拓展作战推演、仿真对抗、精确量算等信息化教学手段应用,助推科技融合的实践教学模式创新,为陆军转型建设、部队练兵备战提供了有力的科技支撑和人才支撑。



图为作战实验室成员在模拟训练中心调试新系统。

钱坤摄

月球之上取水制氧?

■于童 宋琢

近期,意大利科学家就制造并测试了一款可以高效、自主地从人工月球尘土中提取水和氧气的装置——

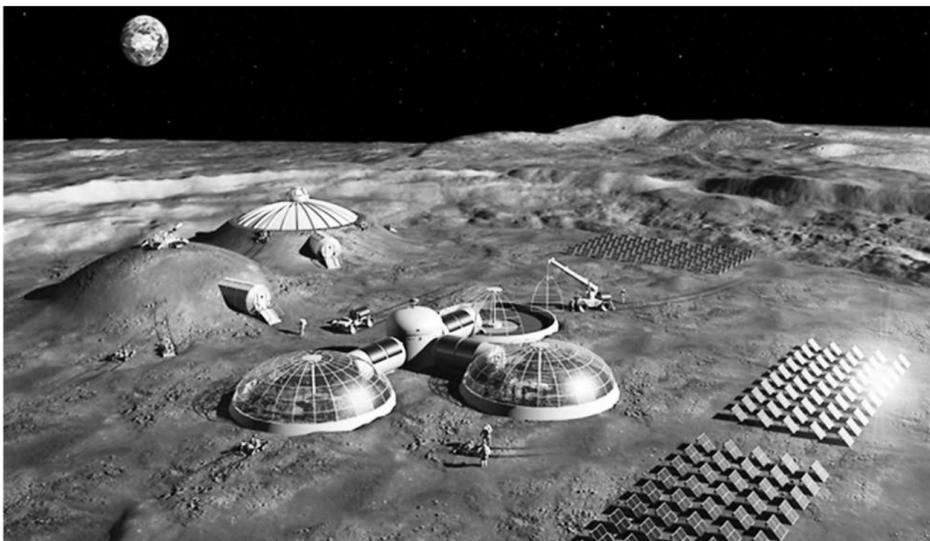
月球上大约一半的土壤是由硅或铁的氧化物构成。也就是说,月球上实际有充足的氧,只不过并非以气体形式存在,它被困在了月球表面的风化层中。而从人工月球尘土中提取水和氧气的装置,其主要构成是一个通过电阻加热升温到1000℃的熔炉。这样的高温可使被送入熔炉的月球尘土中的某些成分变成气态,研究人员再向炉内添加化学辅料(主要含有氢气和甲烷)。这些气体与化学辅料发生化学反应,便可从中提取氧气和水。而提取水和氧气后,辅料再还原,便可回炉重复利用。

研究人员测试了该系统的几个不同方案,包括改变熔炉温度、月球岩石和加入其中的气体混合物的成分比例,以及这一过程中各个步骤的时长。最高效的方案从人工月球尘土中提取了24%的氧,占尘土样本总质量的11%。

据研究人员介绍,该设备可在没有人工干预的情况下做到这一点,且无堵塞。未来的探月者可以布置好这个装备,让它自行产氧。整个过程相对简单,人们可根据任务需要,在一定程度上扩大或缩小生产规模。

如此一来,月球取水制氧一旦取得突破,月球的基建计划或将不再是梦想。

左图:在月球上取水制氧模拟图。



新看点

随着人类探月工程的不断实施,“尝试在月球上建造基地”为人所关注。在这一想法变成现实之前,要解决的一个关键性问题就是,在月球上如何找到水和氧气。

众所周知,水和氧气是维持生命活动的“必需品”。宇航员在登月过程中,必须携带足够的氧气,以供呼吸以及燃料支持。但是,自身携带量毕竟有限。通过探测表明,月球表面上的尘埃和土壤里“藏”有水和氧,如果可以高效提取,则是一个解决水和氧气问题的非常理想的方案。