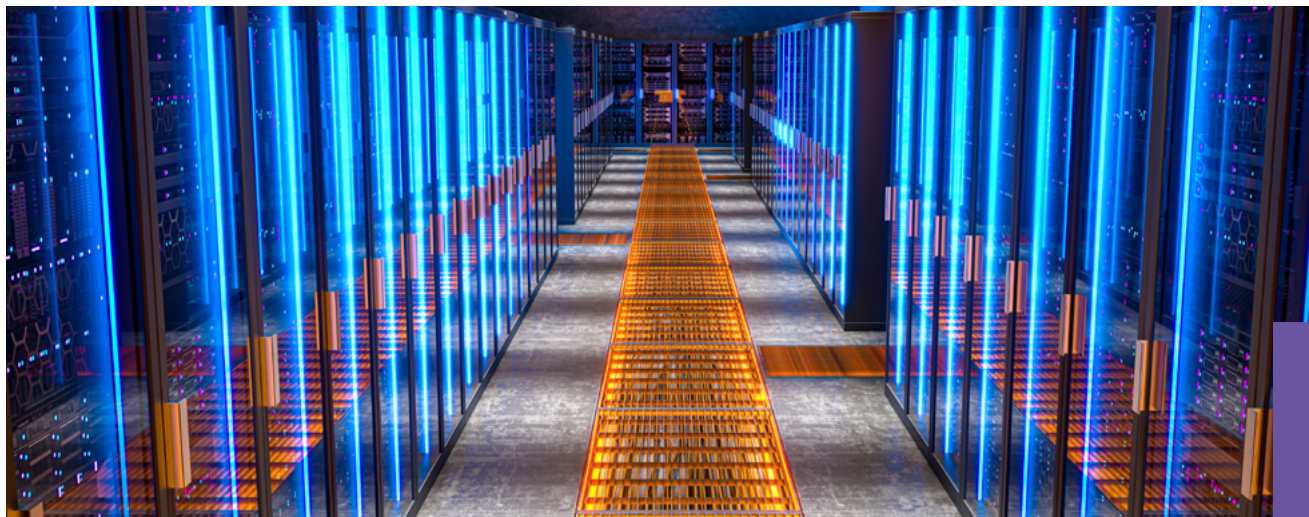




GABRIEL WLAZŁOWSKI (POLITECHNIKA WARSZAWSKA, WYDZIAŁ FIZYKI)

OD ATOMÓW DO TURBULENCJI: KWANTOWY ŚWIAT WIDZIANY OCZAMI SUPERKOMPUTERÓW

Współczesne superkomputery stają się „mikroskopami” umożliwiającymi podgląd zjawisk kwantowych, których nie da się ani zobaczyć, ani dotknąć. Dzięki nim możliwe jest modelowanie zachowania pojedynczych atomów, a także śledzenie chaotycznej dynamiki w najzimniejszych substancjach we Wszechświecie. W artykule przedstawiono, jak wyglądają takie maszyny i dlaczego są one niezbędne do badania świata cząstek. Wyjaśniono, dlaczego równania mechaniki kwantowej są tak trudne do rozwiązania oraz w jaki sposób naukowcy radzą sobie z opisem układów składających się z ogromnej liczby cząstek, ze szczególnym naciskiem na modelowanie nadprzewodników i nadciężkich gazów. Postępy, jakie dokonały się w ostatniej dekadzie w fizyce obliczeniowej, zilustrowano na przykładzie turbulencji kwantowej: zjawiska tak złożonego, że jeszcze niedawno pozostawało poza zasięgiem możliwości technicznych. Na koniec zarysowano perspektywy dalszego rozwoju, stawiając pytanie, czy komputery kwantowe zmienią oblicze nauki, czy raczej staną się kolejnym elementem znanych już architektur superkomputerowych.

WSPÓŁCZESNE SUPERKOMPUTERY

Komputery stały się nieodzowną częścią współczesnego świata. Towarzyszą nam zarówno w pracy, jak i w rozrywce, lecz ich rola wykracza dziś daleko poza codzienne zastosowania. Pojawienie się dużych maszyn obliczeniowych zapoczątkowało rozwój nowej gałęzi nauki: fizyki obliczeniowej. Jest to dziedzina, w której prawa fizyki zapisywane są w postaci równań matematycznych, a następnie rozwiązywane numerycznie przy użyciu komputerów. Fizyka obliczeniowa tworzy dziś trzeci, równorzędny filar badań naukowych, obok eksperymentu i teorii. Modelowanie numeryczne pozwala bowiem łączyć świat współczesnych eksperymentów, często niezwykle złożonych, w których wiele efektów jednocześnie wpływa na końcowy wynik pomiaru, ze światem fizyki teoretycznej, która z natury dąży do uproszczonego i uniwersalnego opisu zjawisk. Co więcej, symulacje komputerowe umożliwiają badanie obiektów i procesów zachodzących w warunkach całkowicie niedostępnych eksperymentom, takich jak wnętrza gwiazd neutronowych, gdzie materia osiąga gęstości i temperatury niemożliwe do odtworzenia na Ziemi.

Znaczenie tego podejścia najlepiej ilustrują wielkie osiągnięcia współczesnej nauki. Nagroda Nobla w dziedzinie

chemii w 1998 roku, którą otrzymał John Pople, uhonorowała rozwój metod obliczeniowych umożliwiających precyzyjne modelowanie zachowania układów molekularnych^[1]. Wyróżnienie to bywa uznawane za pierwszą Nagrodę Nobla przyznaną za osiągnięcia z zakresu fizyki obliczeniowej. W 2021 roku Nagroda Nobla z fizyki została przyznana za modelowanie klimatu Ziemi^[2], uzasadniając, że bez wielkoskalowych symulacji numerycznych zrozumienie zmian klimatycznych oraz ich wiarygodne prognozowanie byłoby niemożliwe. Z kolei spektakularna detekcja fal grawitacyjnych, nagrodzona Noblę w 2017 roku, opierała się na niezwykle zaawansowanych symulacjach numerycznych zderzeń czarnych dziur, które pozwoliły rozpoznać sygnał ukryty w szumie detektorów^[3]. Najnowszym przykładem są Nagrody Nobla z 2024 roku. Nagroda w dziedzinie fizyki została przyznana za rozwój sztucznych sieci neuronowych i metod uczenia maszynowego^[4]. Są to narzędzia, które coraz częściej stają się integralną częścią fizyki obliczeniowej, umożliwiając analizę ogromnych zbiorów danych oraz odkrywanie praw rządzą-

1 John A. Pople, "Quantum chemical models," Nobel Prize lecture, NobelPrize.org (1998).

2 Syukuro Manabe, "Physical modelling of Earth's climate," Nobel Prize lecture, NobelPrize.org (2021).

3 Kip S. Thorne, "LIGO and gravitational waves iii," Nobel Prize lecture, NobelPrize.org (2017).

4 Geoffrey E. Hinton, "Boltzmann machines," Nobel Prize lecture, NobelPrize.org (2024).

cych złożonymi układami. Z kolei Nagroda Nobla w dziedzinie chemii została przyznana za obliczeniowe projektowanie białek oraz przewidywanie ich struktury^[5]. To osiągnięcie ma ogromne znaczenie dla biotechnologii i medycyny. Wszystkie te przykłady pokazują, że współczesna fizyka coraz częściej rozgrywa się nie tylko w laboratoriach i na kartach zeszytów, lecz także, a czasem przede wszystkim, w pamięci komputerów.

Złożoność współczesnych problemów naukowych sprawia, że do ich rozwiązywania nie wystarczają już standardowe komputery osobiste. W takich przypadkach naukowcy sięgają po dedykowane maszyny obliczeniowe, zwane superkomputerami. Aby uzmysłować sobie skalę ich możliwości, często przywołuje się podstawowe parametry techniczne, takie jak liczba procesorów czy ilość dostępnej pamięci operacyjnej. Patrząc przez ten pryzmat, można powiedzieć, że współczesny superkomputer oferuje zasoby porównywalne z pracą kilku milionów laptopów działających jednocześnie. Skala ta znajduje również odzwierciedlenie w fizycznych rozmiarach takich systemów. Superkomputery zajmują zazwyczaj powierzchnię porównywalną z kortem tenisowym, a ich zapotrzebowanie energetyczne mierzone jest w megawatach (porównywalne z zużyciem energii przez niewielkie miasto). Podstawową miarą ich możliwości obliczeniowych jest jednak nie rozmiar czy pobór mocy, lecz wydajność, wyrażana w liczbie operacji zmiennoprzecinkowych na sekundę, czyli FLOPS. Największe współczesne systemy osiągnęły dziś poziom eksaskali, wykonując ponad 10^{18} operacji matematycznych w ciągu jednej sekundy. Nowoczesne superkomputery budowane są w oparciu o architekturę hybrydową

łącącą klasyczne procesory ogólnego przeznaczenia (CPU) z akceleratorami graficznymi (GPU). Takie podejście pozwala znacząco zwiększyć wydajność obliczeń przy rozsądnym zużyciu energii i jest obecnie standardem w największych centrach obliczeniowych. Przykładem takiego systemu jest LUMI^[6] zlokalizowany w Kajaani (Finlandia) i pokazany na rys. 1. Jest to jeden z najpotężniejszych superkomputerów na świecie, wykorzystywany m.in. do symulacji klimatu, badań materii kwantowej oraz zastosowań sztucznej inteligencji.

W fizyce dobrze znana jest idea sformułowana przez Philipa Andersona w klasycznym artykule *More is different*^[7]. Jej istota polega na tym, że wraz ze wzrostem rozmiaru układu mogą pojawiać się nowe, kolektywne zjawiska, których nie da się przewidzieć na podstawie własności pojedynczych elementów. Inaczej zachowuje się kilka atomów, a inaczej materia złożona z ich ogromnej liczby. Zasada ta ma również

ZŁOŻONOŚĆ WSPÓŁCZESNYCH PROBLEMÓW NAUKOWYCH SPRAWIA, ŻE DO ICH ROZWIĄZYWANIA NIE WYSTARCZAJĄ JUŻ STANDARDOWE KOMPUTERY OSOBISTE

bezpośrednie zastosowanie do superkomputerów. Ich istotą nie jest jedynie to, że składają się z ogromnej liczby procesorów czy dysponują olbrzymią pamięcią operacyjną (podobny efekt można by próbować osiągnąć, gromadząc dużą liczbę zwykłych komputerów). Kluczowe

znaczenie ma fakt, że wszystkie te elementy mogą pracować kolektywnie, jako jeden spójny organizm obliczeniowy, rozwiązując wspólnie pojedynczy, niezwykle złożony problem. Z punktu widzenia użytkownika superkomputera często ważniejsza od samej liczby procesorów okazuje się jakość sieci łączącej poszczególne węzły, stabilność systemu oraz to, jak duży fragment maszyny może pracować jednocześnie bez

6 LUMI Consortium, "Lumi supercomputer," <https://lumi-supercomputer.eu/> (2023), accessed: 2026-01-11.

7 P. W. Anderson, "More is different: Broken symmetry and the nature of the hierarchical structure of science." *Science* 177, 393–396 (1972).

5 David Baker, "De novo protein design," Nobel Prize lecture, NobelPrize.org (2024).



Rys. 1. LUMI: superkomputer EuroHPC klasy przedeksaskalowej należący do najpotężniejszych systemów obliczeniowych na świecie. Jego podstawowym elementem są węzły obliczeniowe wyposażone w akceleratorzy graficzne AMD Instinct MI250X. Każdy węzeł GPU zawiera jeden procesor CPU AMD EPYC oraz cztery karty graficzne MI250X. Każda z tych kart składa się z dwóch niezależnych układów obliczeniowych, co oznacza, że pojedynczy węzeł udostępnia łącznie osiem równoległych jednostek GPU do obliczeń naukowych. Cały system obejmuje ponad 2900 takich węzłów GPU połączonych ultraszybko siecią, co umożliwia ich kolektywną pracę przy rozwiązywaniu jednego, bardzo złożonego problemu.

zakłóceń. Właśnie ta kolektywna natura obliczeń sprawia, że superkomputery umożliwiają badanie problemów jakościowo nowych, niedostępnych dla standardowych komputerów. Przejście na taką skalę wymaga jednak również zmiany sposobu myślenia o algorytmach: zamiast pytać „jak rozwiązać dany problem”, coraz częściej trzeba pytać „jak pozwolić rozwiązać go całemu kolektywowi procesorów działających równolegle”.

Superkomputery są dziś podstawowym narzędziem badań naukowych w dziedzinach, w których kluczową rolę odgrywa skala i złożoność. Umożliwiają modelowanie globalnej cyrkulacji atmosfery i długoterminowych zmian klimatu, symulacje złożonych przepływów płynów i turbulencji, badania procesów astrofizycznych (od formowania gwiazd po zderzenia gwiazd neutronowych) a także obliczenia kwantowe opisujące własności materiałów, molekuł i układów wielu ciał. Superkomputery są również niezbędne w chemii obliczeniowej i biologii molekularnej, w badaniach nad energią (w tym fuzją jądrową), w analizie wielkoskalowych danych obserwacyjnych oraz w rozwoju metod sztucznej inteligencji i uczenia maszynowego. W wielu z tych obszarów wysokowydajne obliczenia nie stanowią jedynie wsparcia, lecz są warunkiem koniecznym prowadzenia badań na światowym poziomie^[8].

Dostęp do superkomputerów nie polega na ich zakupie przez pojedynczych badaczy, lecz jest przyznawany w drodze konkursów obliczeniowych organizowanych na poziomie krajowym i międzynarodowym. Naukowcy składają wnioski opisujące planowane badania, a przyznane zasoby trafiają do projektów o najwyższej wartości naukowej. W Europie rozwojem infrastruktury superkomputerowej i przyznawaniem do niej dostępu zajmuje się EuroHPC^[9]. Inicjatywa finansowana jest ze środków Unii Europejskiej, państw członkowskich oraz partnerów przemysłowych. Największy europejski superkomputer to Jupiter (Niemcy) o mocy obliczeniowej 1.2 ExaFLOPS. Według listy Top500^[10], która klasyfikuje superkomputery na podstawie ich wydajności, system ten zajmował pod koniec 2025 roku czwarte miejsce na świecie. W Polsce infrastrukturę obliczeniową udostępniają m.in. ACK Cyfronet (Kraków), PCSS (Poznań), ICM (Warszawa), WCSS (Wrocław) oraz CI TASK (Gdańsk). Największym superkomputerem w Polsce jest system Helios GPU (19 PetaFLOPS), zlokalizowany w Krakowie. Polska jest również współwłaścicielem superkomputera LUMI (0.53 ExaFLOPS), który znajduje się obecnie w pierwszej dziesiątce najszybszych komputerów świata. Istotną rolę odgrywa także inicjatywa PLGrid^[11] integrująca krajowe zasoby obliczeniowe i ułatwiająca naukowcom dostęp do rozproszonej infrastruktury superkomputerowej. Dzięki temu polscy badacze mogą realizować projekty wymagające ogromnych mocy obliczeniowych, co daje możliwość prowadzenia badań na światowym poziomie.

WIELOCIAŁOWE RÓWNANIE SCHRÖDINGERA JAKO WYZWANIE FIZYKI OBLICZENIOWEJ

Jednym z najtrudniejszych problemów współczesnej fizyki teoretycznej i obliczeniowej jest rozwiązywanie równania Schrödingera dla układów składających się z wielu cząstek. Dla uproszczenia rozważań, skupmy się na jego wariancie stacjonarnym, który można zapisać w postaci:

$$\hat{H}\Psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E_n\Psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (1)$$

gdzie $\hat{H}$ jest operatorem Hamiltona (definiującym układ), E_n oznacza energię odpowiadającą danemu stanowi, a Ψ_n jest funkcją falową układu składającego się z N cząstek. Dla przejrzystości pominięto tu dodatkowe stopnie swobody, takie jak spin.

Funkcja falowa jest centralnym obiektem mechaniki kwantowej. Zawiera ona pełną informację o badanym układzie. Znając ją, można w zasadzie obliczyć wartość dowolnej obserwabli, czyli wielkości możliwej do zmierzenia eksperymentalnie. Fundamentalnym problemem jest jednak fakt, że rozmiar funkcji falowej rośnie niezwykle szybko wraz z liczbą cząstek. Aby to zilustrować, załóżmy, że pojedyncza cząstka

może znajdować się w jednym z M możliwych stanów (jest to tzw. rozmiar bazy jednocząstkowej). Wówczas funkcja falowa jednej cząstki $\Psi_n(\mathbf{r}_1)$ jest opisana wektorem długości M , funkcja dwucząstkowa $\Psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ wektorem długości M^2 , natomiast funkcja falowa układu N -cząstkowego $\Psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ wymaga już M^N współczynników. Oznacza to, że rozmiar przestrzeni stanów rośnie wykładniczo wraz z liczbą cząstek, co czyni rozwiązywanie równania Schrödingera problemem obliczeniowo niezwykle trudnym.

Istnieją metody, których celem jest bezpośrednie rozwiązanie równania Schrödingera (1), czyli wyznaczenie funkcji falowej układu, a następnie obliczenie z niej interesujących nas obserwabli. Są to tzw. metody *ab initio*, oparte wyłącznie na fundamentalnych prawach mechaniki kwantowej, bez wprowadzania parametrów dopasowywanych do danych doświadczalnych. Jednym z najbardziej klasycznych i koncepcyjnie najprostszych przykładów jest metoda dokładnej diagonalizacji (ang. *exact diagonalization*). W tym podejściu równanie Schrödingera traktowane jest wprost jako zagadnienie własne: konstruuje się macierz Hamiltonianu w zadanej bazie stanów, a następnie numerycznie wyznacza się jej wartości własne E_n oraz odpowiadające im wektory własne Ψ_n . Głównym wyzwaniem technicznym jest tu diagonalizacja macierzy o ogromnych rozmiarach, której wymiar wynosi $M^N \times M^N$. Metoda dokładnej diagonalizacji znajduje zastosowanie w wielu działach fizyki i chemii, m.in. w badaniach układów spinowych, silnie skorelowanych modeli elektronowych, ultrazimnych gazów atomowych, fizyce jądrowej, chemii kwantowej oraz fizyce atomowej. Jej uniwersalność wynika z faktu, że opiera się bezpośrednio na strukturze równania Schrödingera, a nie na szczególnych własnościach konkretnego układu.

W praktyce rzadko interesują nas wszystkie stany energetyczne Hamiltonianu. Najczęściej wystarcza znajomość stanu podstawowego oraz kilku najniższych stanów wzbudzonych. W takich przypadkach zamiast pełnej diagonalizacji stosuje się iteracyjne metody Kryłowa, w szczególności algorytm

8 Jack Dongarra et al., "The international exascale software project roadmap," The International Journal of High Performance Computing Applications 25, 3-60 (2011);

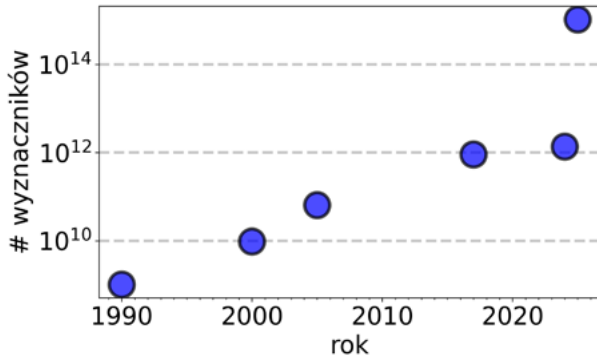
Álvaro Fernández-González, Rafael Rosillo, José Ángel Miguel-Dávila, and Vicente Matellán, "Historical review and future challenges in supercomputing and networks of scientific communication," The Journal of Supercomputing 71, 4476-4503 (2015);

Daniel Reed, Dennis Gannon, and Jack Dongarra, "Re-inventing high performance computing: Challenges and opportunities," (2022), arXiv:2203.02544 [cs.DC].

9 EuroHPC Joint Undertaking, "Eurohpc joint undertaking," <https://www.eurohpc-ju.europa.eu> (2026), accessed: 2026-01-11.

10 TOP500 Organization, "Top500: Lista najszybszych superkomputerów na świecie," <https://www.top500.org/> (2025), accessed: 2026-01-11.

11 PLGrid Consortium, "PLGrid: ogólnopolska infrastruktura obliczeniowa," <https://www.plgrid.pl/> (2025), accessed: 2026-01-11.



Rys. 2. Postęp w czasie w zakresie maksymalnego rozmiaru układów badanych metodą FCI, mierzony liczbą uwzględnianych wyznaczników Slatera.

Rysunek opracowany na podstawie danych z pracy A. Shayit et al., "Numerically exact configuration interaction at quadrillion-determinant scale," Nature Communications 16 (2025), 10.1038/s41467-025-65967-7.

Lanczos^[12]. Metody te są wydajne pod warunkiem, że macierz Hamiltonianu jest rzadka, tzn. że liczba jej niezerowych elementów stanowi niewielki ułamek całkowitej liczby elementów macierzy. Rzadkość ta może wynikać bezpośrednio z lokalnej postaci oddziaływań w Hamiltonianie, ale często jest także osiągana dzięki wprowadzaniu kontrolowanych przybliżeń lub obcięć przestrzeni stanów.

W zależności od działu fizyki ta sama idea obliczeniowa funkcjonuje pod różnymi nazwami. Przykładowo, w fizyce jądrowej metoda dokładnej diagonalizacji znana jest współcześnie jako model powłokowy (ang. *shell model*). Dzięki wykorzystaniu superkomputerów możliwe jest obecnie rozwiązywanie zagadnień własnych dla macierzy o rozmiarach sięgających nawet 10¹⁰^[13]. Choć liczby te robią ogromne wrażenie, w świetle wykładniczego wzrostu przestrzeni stanów wystarczają one jedynie do opisu jąder atomowych o liczbie nukleonów nieprzekraczającej około 80.

W fizyce atomowej oraz chemii kwantowej analogicznym podejściem jest metoda pełnego oddziaływania konfiguracji (ang. *Full Configuration Interaction*, FCI). Jest ona powszechnie uważana za złoty standard w badaniach własności atomów i małych cząsteczek, ponieważ (w obrębie zadanej bazy jedno-cząstkowej) dostarcza rozwiązania dokładnego. W metodzie FCI funkcja falowa zapisywana jest jako liniowa kombinacja wyznaczników Slatera, które reprezentują różne konfiguracje elektronowe (liczba uwzględnionych wyznaczników Slatera wyznacza rozmiar macierzy Hamiltonianu). Konfiguracje te generowane są zwykle jako wzbudzenia względem pewnego stanu odniesienia najczęściej pochodzącego z obliczeń metodą pola średniego, taką jak metoda Hartreego-Focka. Skala obliczeń FCI rośnie jednak bardzo szybko wraz z liczbą elektronów. W 2025 roku zaprezentowano rekordowe obliczenia tego typu, w których liczba wyznaczników Slatera przekroczyła 10¹⁵^[14]. Dotyczyły one cząsteczki HBrTe, a wyniki zostały uzyskane dzięki połączeniu zaawansowanych algorytmów i dużych zasobów superkomputerowych. Podobnie jak

w przypadku modelu powłokowego, także tutaj liczba cząstek pozostaje relatywnie niewielka: nawet w rekordowych obliczeniach FCI liczba elektronów nie przekraczała 100, a w cytowanej pracy wynosiła 88.

Rys. 2 ilustruje ogromny postęp, jaki dokonał się w ostatnich latach zarówno w zakresie rozwoju algorytmów obliczeniowych, jak i w budowie nowoczesnych superkomputerów. Umożliwił on znaczące zwiększenie rozmiaru układów, które mogą być badane metodą oddziaływania konfiguracji. Niemniej jednak, wykładnicza złożoność problemu wielu ciał pozostaje jednym z fundamentalnych ograniczeń kwantowej fizyki obliczeniowej. Nawet przy obecnym tempie rozwoju algorytmów i sprzętu obliczeniowego zastosowanie metod dokładnej diagonalizacji do układów składających się z tysięcy cząstek wydaje się praktycznie nieosiągalne.

DROGA DO DUŻYCH UKŁADÓW: TEORIA FUNKCJONAŁU GĘSTOŚCI

W celu badania układów kwantowych składających się dużej ilości cząstek (rzędu setek, tysięcy, a nawet dziesiątek tysięcy) podstawowym narzędziem współczesnej fizyki obliczeniowej stała się teoria funkcjonału gęstości (ang. *Density Functional Theory*, DFT)^[15]. Jej fundamentem są twierdzenia Hohenberga-Kohna sformułowane w latach sześćdziesiątych XX wieku^[16]. Pominiemy tu ich ścisłą postać matematyczną, koncentrując się na konsekwencjach fizycznych, które zrewolucjonizowały sposób myślenia o problemie wielu ciał.

Hohenberg i Kohn rozważali relację pomiędzy funkcją falową stanu podstawowego Ψ_0 a gęstością cząstek (pierwotnie elektronów). Znając funkcję falową, można wyznaczyć gęstość jako:

$$\rho_0(\mathbf{r}) = N \int |\Psi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d^3\mathbf{r}_2 \dots d^3\mathbf{r}_N, \quad (2)$$

co oznacza, że istnieje jednoznaczne mapowanie. Kluczową konsekwencją twierdzeń Hohenberga-Kohna jest jednak fakt, że relacja ta działa również w drugą stronę: znając gęstość stanu podstawowego, można w zasadzie odzyskać odpowiadającą jej funkcję falową, czyli $\Psi_0 \leftrightarrow \rho_0$. Twierdzenie to nie dostarcza konstruktywnego przepisu, jak tego dokonać, lecz dowodzi istnienia takiego mapowania. Już sam ten fakt ma jednak daleko idące następstwa. Formalnie możemy zapisać:

$$\Psi_0 = \Psi_0[\rho_0], \quad (3)$$

czyli, że funkcja falowa staje się funkcjonałem gęstości. Ponieważ każdą obserwabłą O można obliczyć jako wartość oczekiwaną odpowiedniego operatora $\hat{O}$ w stanie Ψ_0 , otrzymujemy:

$$O[\rho_0] = \langle \Psi_0[\rho_0] | \hat{O} | \Psi_0[\rho_0] \rangle. \quad (4)$$

W szczególności dotyczy to energii układu:

$$E[\rho_0] = \langle \Psi_0[\rho_0] | \hat{H} | \Psi_0[\rho_0] \rangle. \quad (5)$$

Energia stanu podstawowego jest najniższą możliwą wartością tego funkcjonału:

$$E_0 = E[\rho_0] = \min_{\rho} E[\rho]. \quad (6)$$

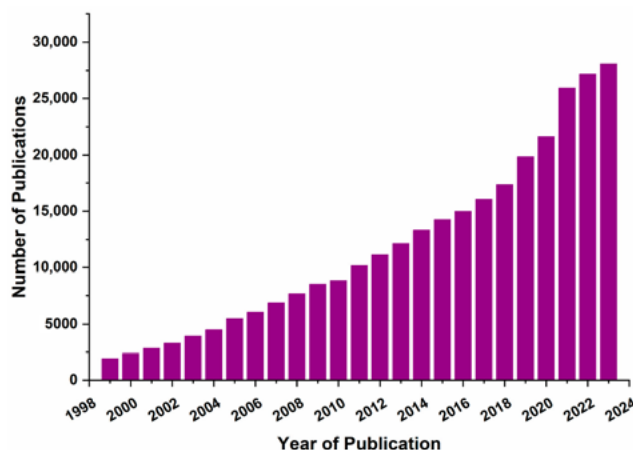
¹² Yousef Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems* (Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003).

¹³ C. Forsén, B. D. Carlsson, H. T. Johansson, D. Sääf, A. Bansal, G. Hagen, and T. Papenbrock, "Large-scale exact diagonalizations reveal low-momentum scales of nuclei," *Phys. Rev. C* 97, 034328 (2018); Noritaka Shimizu, Takahiro Mizusaki, Yutaka Utsuno, and Yusuke Tsunoda, "Thick-restart block lanczos method for large-scale shell-model calculations," *Computer Physics Communications* 244, 372–384 (2019).

¹⁴ Agam Shayit, Can Liao, Shiv Upadhyay, Hang Hu, Tianyuan Zhang, A. Eugene DePrince III, Chao Yang, and Xiaosong Li, "Numerically exact configuration interaction at quadrillion-determinant scale," *Nature Communications* 16 (2025), 10.1038/s41467-025-65967-7.

¹⁵ Carlos Fiolhais, Fernando Nogueira, and Miguel A. L. Marques, eds., *A Primer in Density Functional Theory*, Lecture Notes in Physics (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2003).

¹⁶ P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomogeneous Electron Gas," *Phys. Rev.* 136, B864–B871 (1964).



Rys. 3. Liczba publikacji w latach 1999–2023 według bazy Web of Science, w których fraza „Density Functional Theory” lub skrót „DFT” pojawia się w streszczeniu artykułu.

Wykres przedrukowany z publikacji Konstantinos P. Zois, D. Tzeli, “A critical look at density functional theory in chemistry: Untangling its strengths and weaknesses,” *Atoms* 12, 65 (2024), doi: 10.3390/atoms12120065, licencja CC-BY 4.0

W ten sposób oryginalny problem rozwiązywania wielociałowego równania Schrödingera zostaje formalnie sprowadzony do zagadnienia minimalizacji funkcjonału energii.

Najistotniejszą zaletą tego podejścia jest fakt, że w tym procesie nie posługujemy się bezpośrednio funkcją falową, której rozmiar rośnie wykładniczo wraz z liczbą cząstek, lecz gęstością $\rho(\mathbf{r})$. Niezależnie od liczby cząstek pozostaje ona funkcją jednej zmiennej przestrzennej, co drastycznie zmniejsza złożoność problemu obliczeniowego. Metoda ta posiada jednak zasadniczy mankament: nie istnieje znana procedura matematyczna, która pozwalałaby wyznaczyć dokładną postać funkcjonału energii $E[\rho]$. Gdyby był on znany, można by bezpośrednio obliczać energię stanu podstawowego oraz odpowiadającą mu gęstość. Mamy tu do czynienia z typową w nauce sytuacją, w której uproszczenie jednego problemu (obliczania stanu podstawowego) prowadzi do pojawienia się nowego i równie trudnego (znajdowania funkcjonału energii).

Richard Feynman w jednym ze swoich wykładów stwierdził, że „fizyka to nie matematyka, a matematyka to nie fizyka; jedno pomaga drugiemu”. Brak ścisłego wyprowadzenia matematycznego nie musi zatem stanowić fundamentalnej przeszkody dla rozwoju metody. Fizycy dysponują innymi narzędziami pozwalającymi na konstrukcję przybliżonych funkcjonałów gęstości: intuicją fizyczną, wynikami eksperymentów oraz danymi uzyskanymi z dokładnych obliczeń, gdzie funkcja falowa może być jeszcze wyznaczona wprost. Analizując zależność energii od gęstości w takich przypadkach, można budować coraz lepsze przybliżenia funkcjonału $E[\rho]$. Istotnym elementem teorii funkcjonału gęstości jest fakt, że poszukiwany funkcjonał ma charakter uniwersalny i zależy jedynie od rodzaju cząstek oraz ich oddziaływań. Oznacza to, że dla układów elektronowych istnieje jeden uniwersalny funkcjonał, dla układów jądrowych inny, analogicznie dla materii silnie oddziałującej czy plazmy.

Od czasu sformułowania twierdzeń Hohenberga–Kohna zaproponowano wiele przybliżonych funkcjonałów gęstości, a także skutecznych metod ich minimalizacji. Najpopularniejszym i praktycznie uniwersalnym podejściem jest metoda Kohna–Shama^[17], która sprowadza problem wielu oddziałujących cząstek do układu efektywnych równań jednoczątkowych. Dziś DFT jest jedną z najczęściej stosowanych metod

obliczeniowych w fizyce i chemii, a także jedną z najbardziej wpływowych metod w całej nauce. Potwierdza to fakt, że aż 12 prac dotyczących DFT znalazło się wśród stu najczęściej cytowanych artykułów naukowych wszech czasów, z czego dwie w pierwszej dziesiątce^[18].

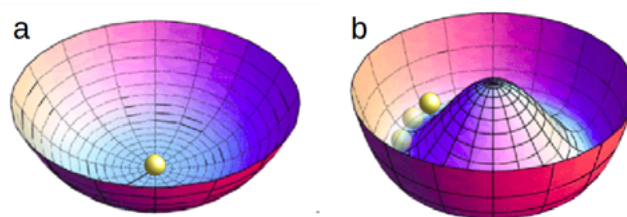
Zastosowania teorii funkcjonału gęstości obejmują niezwykle szerokie spektrum zagadnień: od chemii kwantowej i fizyki ciała stałego, przez fizykę jądrową i modelowanie plazmy w kontekście fuzji termojądrowej, aż po zastosowania w materiałoznawstwie, biologii i medycynie^[19]. Wraz ze wzrostem złożoności funkcjonałów oraz rozmiarów badanych układów, praktyczne obliczenia DFT coraz częściej wymagają wykorzystania nowoczesnych superkomputerów. W istocie obliczenia oparte na DFT należą dziś do najczęściej realizowanych zadań na dużych systemach obliczeniowych, obok symulacji klimatycznych oraz, coraz częściej, algorytmów uczenia maszynowego i sztucznej inteligencji. Rys. 3 ilustruje dynamiczny wzrost liczby publikacji, w których wykorzystano teorię funkcjonału gęstości. Obecnie podejście to generuje wyniki dla dziesiątek tysięcy prac naukowych publikowanych każdego roku.

MODELOWANIE UKŁADÓW NADPRZEWODZĄCYCH I NADCIĘKŁYCH

Wobec ogromnego zakresu zastosowań teorii funkcjonału gęstości naturalnie pojawia się pytanie, czy metoda może zostać wykorzystana również do modelowania układów nadprzewodzących i nadciekłych. Jest to zagadnienie o fundamentalnym znaczeniu, ale także o ogromnym potencjale aplikacyjnym. Opracowanie nadprzewodników działających w temperaturze pokojowej stanowiłoby przełom technologiczny o dalekosiężnych konsekwencjach. Należy jednak podkreślić, że teoria DFT została pierwotnie sformułowana z myślą o materiałach w stanie normalnym, co prowadzi do istotnych ograniczeń w opisie faz nadprzewodzących i nadciekłych. W szczególności twierdzenie Hohenberga–Kohna zakłada, że stan podstawowy układu jest niezdegenerowany. Warunek ten nie jest spełniony w przypadku nadprzewodników i układów nadciekłych, gdzie mamy do czynienia ze zjawiskiem spontanicznego złamania symetrii. Układ przechodząc do fazy nadprzewodzącej wybiera jeden z nieskończenie wielu równoważnych stanów o tej samej energii, co prowadzi do pojawienia się parametru porządku. Mechanizm ten zilustrowano schematycznie na rys. 4.

18 Richard Van Noorden, Brendan Maher, and Regina Nuzzo, “The top 100 papers,” *Nature* 514, 550–553 (2014).

19 R. O. Jones, “Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future,” *Rev. Mod. Phys.* 87, 897–923 (2015).



Rys. 4. Schematyczna ilustracja powierzchni energetycznej układu. a) Układ posiada jedno minimum energetyczne, w którym znajduje się stan o najniższej energii. Miejsce to wskazuje położenie żółtej kulki. Taka sytuacja jest typowa dla układów w stanie normalnym. b) Stan o najniższej energii jest zdegenerowany i tworzy ciąg minimów energetycznych. Układ, przechodząc do fazy nadprzewodzącej lub nadciekłej, musi spontanicznie wybrać jedno z nieskończenie wielu równoważnych stanów, co stanowi przykład spontanicznego złamania symetrii.

17 W. Kohn and L. J. Sham, “Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects,” *Phys. Rev.* 140, A1133–A1138 (1965).

Pod koniec lat osiemdziesiątych podstawowe twierdzenie teorii funkcjonału gęstości zostały rozszerzone na układy nadprzewodzące przez Oliveirę, Grossa i Kohna^[20]. Kluczowym elementem tego uogólnienia było wprowadzenie dodatkowej wielkości, tzw. gęstości anomalnej v , która pełni rolę parametru porządku. W konsekwencji funkcjonał energii dla układów nadciekłych i nadprzewodzących musi zależeć od dwóch gęstości:

$$E = E[\rho, v], \quad (7)$$

gdzie ρ jest gęstością cząstek, natomiast v jest zespoloną gęstością anomalną zawierającą informację o fazie parametru porządku i o tym, które minimum energetyczne zostało wybrane w wyniku spontanicznego złamania symetrii. Podobnie jak w przypadku standardowego DFT, formalizm ten nie dostarcza praktycznego przepisu na konstrukcję funkcjonału, co przez długi czas stanowiło główną barierę w rozwoju metod DFT dla układów nadprzewodzących.

Fazy nadprzewodzące i nadciekle charakteryzują się wyjątkowymi własnościami dynamicznymi. Jednym z ich najbardziej spektakularnych przejawów jest możliwość generowania przepływów bez strat energii. W nadprzewodnikach objawia się to zanikiem oporu elektrycznego, natomiast w układach elektrycznie obojętnych, takich jak ultrazimne gazy atomowe czy nadciekły hel, mówimy o zaniku lepkości. Zjawiska te są bezpośrednią konsekwencją kwantowej koherencji. Jednak bezstratny transport nie jest jedyną niezwykłą własnością tych faz. Układy nadciekle i nadprzewodzące mogą również generować defekty topologiczne, z których najbardziej znanym przykładem jest wir kwantowy. Obecność tych defektów odgrywa kluczową rolę w dynamice układów nadciekłych i nadprzewodników, wpływając m.in. na ich odpowiedź na pola zewnętrzne oraz na mechanizmy dysypacji.

Ponieważ w przypadku układów nadciekłych i nadprzewodzących kluczowe znaczenie mają własności dynamiczne, równie istotne stało się uogólnienie teorii funkcjonału gęstości na przypadek zależny od czasu. Celem tego uogólnienia jest stworzenie praktycznej metody umożliwiającej rozwiązywanie zależnego od czasu równania Schrödingera:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t), \quad (8)$$

które stanowi problem znacznie trudniejszy niż jego statyczny odpowiednik. Jedną z wyjątkowych cech teorii funkcjonału gęstości jest fakt, że należy ona do nielicznych metod wielu ciał, które zostały z powodzeniem uogólnione na przypadek dynamiczny. Na poziomie formalnym uogólnienie twierdzenia Hohenberga–Kohna na problemy zależne od czasu zostało przedstawione w latach osiemdziesiątych XX w. w postaci twierdzenia Runego–Grossa^[21], a w kolejnej dekadzie rozszerzono je na układy nadprzewodzące^[22]. Każde z tych uogólnień wiązało się jednak ze znacznym wzrostem złożoności formalizmu, co przez wiele lat ograniczało ich zastosowania do poziomu koncepcyjnego.

Dopiero postęp w dziedzinie superkomputerów oraz intensywne prace nad konstrukcją funkcjonałów energii

doprowadziły do powstania praktycznych narzędzi umożliwiających symulacje kwantowej dynamiki. W szczególności pojawienie się superkomputerów klasy przed-eksaskalowej otworzyło drogę do realistycznych symulacji procesów zachodzących w nadprzewodnikach oraz silnie oddziałujących, nadciekłych gazach fermionowych^[23].

Aby zrozumieć, skąd bierze się duża złożoność obliczeniowa nadciekłych lub nadprzewodzących (oba terminy będą tu używane zamiennie) rozszerzeń teorii funkcjonału gęstości, przyjrzyjmy się podstawowym równaniom leżącym u podstaw współczesnych wariantów tego podejścia. Dla orientacji zaczniemy od klasycznej metody Kohna–Shama dla układów

w stanie normalnym. Formalizm ten opiera się na pojęciu orbitali jednocząstkowych. Każdy orbital $\varphi_n(\mathbf{r}, t)$ może być obsadzony przez jedną cząstkę lub pozostać pusty. Zakłada się, że wszystkie orbitale o energiach mniejszych

od energii Fermiego E_F są obsadzone, natomiast orbitale powyżej tej energii pozostają puste. Gęstość układu otrzymuje się poprzez zsumowanie wkładów pochodzących od wszystkich obsadzonych orbitali:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{0 < E_n < E_F} |\varphi_n(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (9)$$

Zależne od czasu równania Kohna–Shama tworzą zbiór równań różniczkowych cząstkowych opisujących ewolucję poszczególnych orbitali:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{h}(\mathbf{r}, t) \varphi_n(\mathbf{r}, t), \quad (10)$$

gdzie $\hat{h}$ jest tzw. hamiltonianem jednocząstkowym. Zawiera on operator energii kinetycznej, który w mechanice kwantowej jest proporcjonalny do drugiej pochodnej przestrzennej funkcji falowej, oraz człon opisujący oddziaływania pomiędzy cząstkami. Postać tego drugiego zależy od rozmieszczenia cząstek w przestrzeni, a dokładniej od rozkładu ich gęstości $\rho(\mathbf{r}, t)$, zgodnie z główną ideą teorii funkcjonału gęstości. Jego jawna postać ustalana jest przez przyjęty funkcjonał gęstości i nie jest istotna dla dalszych rozważań. Zauważmy, że równanie dla ustalonego orbitala ma taką samą strukturę jak równanie Schrödingera opisujące dynamikę jednej cząstki. Zatem złożony problem wielociałowego równania Schrödingera został zamieniony na zbiór prostszych równań. Kluczowe jest natomiast to, że ewolucja każdego orbitala zależy od ewolucji wszystkich pozostałych, co oznacza, że od strony matematycznej mamy do czynienia z układem wzajemnie sprzężonych równań różniczkowych.

W przypadku układów nadciekłych zamiast orbitali jednocząstkowych rozważa się tzw. orbitale kwazicząstkowe:

$$\varphi_n(\mathbf{r}, t) = [u_n(\mathbf{r}, t), v_n(\mathbf{r}, t)]^T, \quad (11)$$

które opisują superpozycję stanu cząstki i stanu dziury. Składowa v_n odpowiada amplitudzie prawdopodobieństwa znalezienia cząstki, natomiast u_n amplitudzie prawdopodobieństwa znalezienia dziury. Taki opis jest naturalny w układach, w których występuje parowanie fermionów. Na podstawie orbitali kwazicząstkowych definiuje się nie tylko gęstość normalną, lecz także dodatkową gęstość anomalną, związaną z istnieniem parowania.

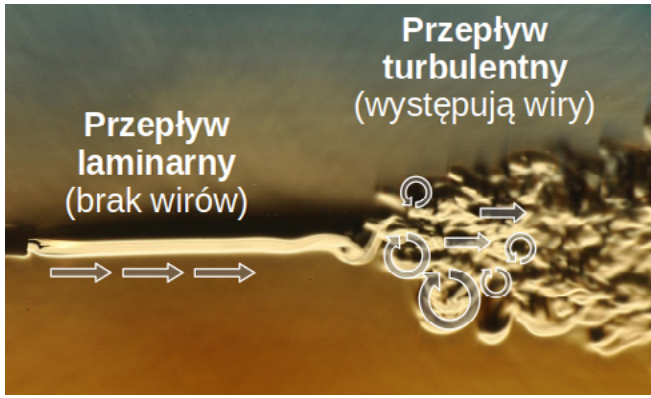
Istotną różnicą względem klasycznego formalizmu Kohna–Shama jest fakt, że w przypadku układów nadciekłych

20 L. N. Oliveira, E. K. U. Gross, and W. Kohn, "Density-functional theory for superconductors," *Phys. Rev. Lett.* 60, 2430–2433 (1988).

21 Erich Runge and E. K. U. Gross, "Density-functional theory for time-dependent systems," *Phys. Rev. Lett.* 52, 997–1000 (1984).

22 O. J. Wacker, R. Kümmel, and E. K. U. Gross, "Time-dependent density-functional theory for superconductors," *Phys. Rev. Lett.* 73, 2915–2918 (1994).

23 Gabriel Włazowski, Michael McNeil Forbes, Saptarshi Rajan Sarkar, Andreas Marek, and Maciej Szpin-dler, "Fermionic quantum turbulence: Pushing the limits of high-performance computing," *PNAS Nexus* 3 (2024), 10.1093/pnasnexus/pgae160.



Rys. 5. Zdjęcie przedstawiające smugę dymu. Początkowo przepływ ma charakter laminarny, natomiast przejście do reżimu turbulentnego objawia się spontanicznym pojawianiem się zawirowań.

Na podstawie rysunku „Laminar-turbulent transition”, Garry Settles, „Wikimedia Commons. File: Laminar-turbulent transition,” https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Laminar-turbulent_transition.jpg, accessed: 2026-01-11, modyfikacja własna.

uwzględnia się stany aż do energii obciążenia E_c , która zazwyczaj znacznie przekracza energię Fermiego^[24]. Wynika to z możliwości częściowego obsadzenia orbitali kwazicząstkowych, co stanowi kluczowy element opisu parowania fermionów. Ponadto względne obsadzenie stanów kwazicząstkowych może ulegać zmianie w trakcie ewolucji. Przykładowo, początkowo pusty kwaziorbital (obsadzony przez dziurę) może zmienić się w kwaziorbital obsadzony przez cząstkę. Co więcej, względne obsadzenie stanów kwazicząstkowych może zmieniać się w trakcie ewolucji układu.

Ewolucja czasowa orbitali kwazicząstkowych wyznaczona jest przez równania o strukturze analogicznej do dobrze znanych z teorii nadprzewodnictwa zależnych od czasu równań Bogoliubova–de Gennesa^[25]:

$$i\hbar \frac{\partial u_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{h}(\mathbf{r}, t) u_n(\mathbf{r}, t) + \Delta(\mathbf{r}, t) v_n(\mathbf{r}, t), \quad (12a)$$

$$i\hbar \frac{\partial v_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\hat{h}^*(\mathbf{r}, t) v_n(\mathbf{r}, t) + \Delta^*(\mathbf{r}, t) u_n(\mathbf{r}, t). \quad (12b)$$

W powyższych równaniach $\hat{h}$ nadal pełni rolę hamiltonianu jednocząstkowego, natomiast Δ jest polem parowania odpowiedzialnym za tworzenie par Coopera, czyli skorelowanych par fermionów o przeciwnych spinach. Człon ten bezpośrednio zależy od gęstości anomalnej i jego jawna postać wynika z wybranego funkcjonału gęstości. To właśnie istnienie niezerowego pola parowania leży u podstaw zjawisk nadprzewodnictwa i nadciekłości.

Złożoność problemu staje się w tym miejscu szczególnie wyraźna. Zarówno hamiltonian $\hat{h}$, jak i pole parowania Δ zależą od gęstości, które z kolei są zdefiniowane poprzez orbitalne kwazicząstkowe $\{u_n, v_n\}$. Oznacza to, że ewolucja każdego orbitala jest sprzężona z ewolucją wszystkich pozostałych. W efekcie otrzymujemy nieliniowy, samouzgodniony problem dynamiki wielu ciał, który w naturalny sposób pozwala opisywać zjawiska o charakterze kolektywnym, w których bierze udział cały układ.

W praktyce równania (12) muszą być rozwiązywane jednocześnie dla wszystkich orbitali kwazicząstkowych

$n = 1, 2, \dots, M$, gdzie M oznacza całkowitą liczbę orbitali uwzględnionych w symulacji. Aby poprawnie opisać dynamikę układów nadciekłych lub nadprzewodzących, liczba ta musi być znacznie większa niż liczba cząstek. W realistycznych zastosowaniach, obejmujących układy składające się z setek bądź tysięcy cząstek, typowe wartości wynoszą $M \sim 10^5 - 10^6$. Z technicznego punktu widzenia problem sprowadza się zatem do numerycznego rozwiązywania układu setek tysięcy, a niekiedy nawet milionów sprzężonych nieliniowych równań różniczkowych cząstkowych. Tego typu zadania mogą być realizowane wyłącznie z wykorzystaniem nowoczesnych superkomputerów. Obecny stan rozwoju metod numerycznych oraz infrastruktury obliczeniowej sprawia jednak, że rozwiązywanie tak złożonych problemów stało się możliwe w praktyce.

W kolejnej części przedstawimy przykład zastosowania tego formalizmu do jednego z najbardziej złożonych zjawisk w fizyce wielu ciał – turbulencji kwantowej, której realistyczne modelowanie wymaga właśnie takiej skali obliczeń.

TURBULENCJA KWANTOWA

Zjawisko przepływu turbulentnego uważane jest za jedno z najbardziej złożonych i fundamentalnych problemów nauki. Paradoksalnie problem ten wyłania się z równań hydrodynamiki znanych od niemal dwóch stuleci, a mimo to do dziś nie doczekał się kompletnego, uniwersalnego opisu teoretycznego. Obecnie badania tego zjawiska wykonuje się głównie za pomocą zaawansowanych narzędzi fizyki obliczeniowej z wykorzystaniem ogromnych mocy obliczeniowych.

Cechą charakterystyczną przepływu turbulentnego jest pojawianie się dużej liczby wirów, które współistnieją i oddziałują ze sobą w sposób złożony i dynamiczny. Stanowi to wyraźny kontrast wobec przepływu laminarnego, w którym linie prądu są uporządkowane, a zawirowania zazwyczaj nie występują (zobacz rys. 5). Konsekwencją obecności wirów jest znaczący wzrost strat energii przepływu, co w większości zastosowań technicznych stanowi zjawisko niepożądane. Równania klasycznej hydrodynamiki pozwalają ilościowo opisać tempo tych strat^[26]:

$$\frac{dE_{\text{przepływu}}}{dt} = -\frac{1}{2}\eta \int \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right)^2 dV \quad (13)$$

gdzie v_i oznaczają składowe pola prędkości, a x_i współrzędne przestrzenne ($i, k = 1, 2, 3$). Dla uproszczenia rozważań przyjęto tu przypadek cieczy nieściśliwej. Z powyższego wyrażenia jasno wynika, że straty energii są proporcjonalne

ZJAWISKO PRZEPŁYwu TURBULENTNEGO UWAŻANE JEST ZA JEDNO Z NAJBARDZIEJ ZŁOŻONYCH I FUNDAMENTALNYCH PROBLEMÓW NAUKI OBECNIE BADANIA TEGO ZJAWISKA WYKONUJE SIĘ GŁÓWNIEM ZA POMOCĄ ZAAWANSOWANYCH NARZĘDZI FIZYKI OBLICZENIOWEJ Z WYKORZYSTANIEM OGROMNYCH MOCY OBLICZENIOWYCH

do współczynnika lepkości η oraz do liczby i intensywności gradientów pola prędkości. W przepływie turbulentnym, gdzie struktury wirowe generują silne i szybkozmienne gradienty, prowadzi to do gwałtownego wzrostu dysypacji (czyli rozpraszania) energii.

Układy nadciekle, takie jak nadciekły hel czy ultrazimne gazy atomowe, charakteryzują się jednak zerową lepkością, $\eta = 0$. Kierując się intuicją klasycznej hydrodynamiki, należałoby zatem oczekiwać, że przepływ nadcieczy zawsze bę-

24 Aurel Bulgac, Michael McNeil Forbes, and Piotr Ma-gierski, “The Unitary Fermi Gas: From Monte Carlo to Density Functionals,” in The BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi Gas, Lecture Notes in Physics, edited by Wilhelm Zwerger (Springer, Berlin, Heidelberg, 2012) pp. 305–373.

25 Jian-Xin Zhu, Bogoliubov-de Gennes Method and Its Applications (Springer International Publishing, 2016).

26 Lew D. Landau and Jewgienij M. Lifszic, Hydrodynamika, Fizyka teoretyczna, Vol. 6 (PWN, Warszawa, 2009).

dzie bezstratny. Okazuje się jednak, że to rozumowanie jest błędne. Zarówno eksperymenty, jak i symulacje numeryczne jednoznacznie pokazują, że układy nadciekłe mogą również wykazywać przepływ turbulentny, któremu towarzyszą straty energii pomimo fundamentalnego braku lepkości. Stan taki określa się mianem turbulencji kwantowej. Jest to złożona, nieliniowa i częściowo chaotyczna dynamika układu nadciekłego, która wykazuje zarówno analogie, jak i istotne różnice względem turbulencji klasycznej. Kluczową rolę w tym przypadku odgrywają wiry kwantowe: topologiczne defekty pola parametru porządku, których cyrkulacja jest skwantowana. W przeciwieństwie do wirów klasycznych, wiry kwantowe mają dobrze określoną strukturę i nie mogą zniknąć w sposób ciągły. Oddziaływania między wirami kwantowymi oraz ich zderzenia, prowadzące do tzw. rekoneksji, tworzą efektywny mechanizm transportu energii pomiędzy skalami oraz jej rozpraszania^[27]. W ten sposób w układzie nadciekłym pojawia się efektywna dyssypacja energii, mimo że klasyczny mechanizm lepkości jest nieobecny. O ile turbulencja klasyczna już sama w sobie stanowi niezwykle trudny problem, o tyle turbulencja kwantowa wprowadza dodatkowo poziom złożoności wynikający z kwantowej natury opisywanych obiektów oraz konieczności jednoczesnego uwzględnienia dynamiki falowej i topologicznej struktury układu.

Chociaż do pełnego zrozumienia zjawiska turbulencji kwantowej wciąż prowadzi daleka droga, należy podkreślić ogromny postęp, jaki dokonał się w tej dziedzinie w ostatnich latach. Połączenie nowoczesnych metod numerycznych z potężnymi zasobami obliczeniowymi umożliwiło badanie turbulencji kwantowej z niespotykaną wcześniej szczegółowością. W szczególności stało się to możliwe dzięki zastosowaniu teorii funkcjonału gęstości, która – jako metoda mikroskopowa i silnie zakorzeniona w fundamentalnym równaniu Schrödingera – pozwala na jakościowo nowy wgląd w dynamikę procesów prowadzących do dyssypacji energii w układach nadciekłych^[28].

Od wielu lat na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej prowadzone są prace badawcze, których celem jest stworzenie narzędzia ogólnego przeznaczenia do mikrosko-

powych symulacji układów nadciekłych z wykorzystaniem zależnej od czasu teorii funkcjonału gęstości. W 2024 roku zaprezentowano wyniki symulacji ultrazimnego i nadciekłego gazu (laboratoryjnie zazwyczaj realizowanego z udziałem atomów ^6Li), przeprowadzone z użyciem tej niezwykle dokładnej metody, obejmującej nawet sto tysięcy cząstek^[29].

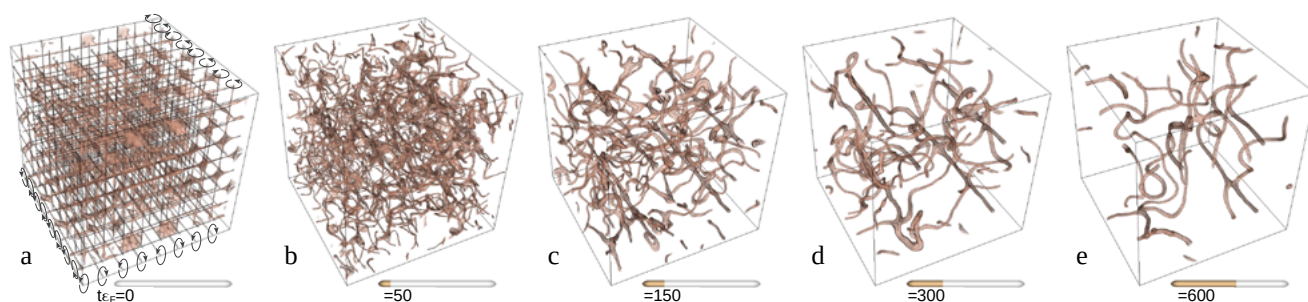
Skala tych obliczeń stanowiła istotny krok naprzód w badaniach dynamiki silnie oddziałujących układów kwantowych. Na rys. 6 przedstawiono wybrane klatki czasowe ilustrujące ewolucję takiego układu. Widoczne na obrazach linie odpowiadają położeniom wirów kwantowych zidentyfikowanych na podstawie analizy struktury przepływu oraz topologii parametru porządku. W trakcie ewolucji wiry splatają się ze sobą, tworząc złożone struktury przestrzenne. Jednocześnie całkowita długość linii wirowych stopniowo maleje, co stanowi bezpośredni wskaźnik zaniku przepływów w układzie, a tym samym spadku energii kinetycznej związanej z ruchem nadcieczy.

Jakościowo nowym i szczególnie istotnym rezultatem tych symulacji jest pogłębione zrozumienie losów energii usuwanej z przepływów. Obliczenia ujawniły mechanizm, w którym energia kinetyczna przepływu jest efektywnie konwertowana na wzbudzenia wewnętrzne układu, potocznie określane jako ciepło. Zaobserwowano, że wzbudzenia te generowane są przede wszystkim w obszarach, w których zlokalizowane są rdzenie wirów kwantowych, czyli linie, wokół których krąży ciecz. Traktując te rdzenie w sposób obrazowy jako cienkie druty, cały proces można porównać do nagrzewania się przewodów w wyniku ich ciągłego wyginania: im bardziej wir ulega deformacjom w trakcie dynamiki, tym intensywniej się nagrzewa. Powstałe w ten sposób ciepło rozprzestrzenia się następnie po całym układzie. Tego rodzaju mechanizm dyssypacji energii ma charakter jakościowo nowy i nie był dotąd obserwowany w symulacjach numerycznych turbulencji kwantowej. Jego identyfikacja była możliwa dzięki zastosowaniu formalizmu kwazicząstek, w którym obsadzenie orbitali kwazicząstkowych może zmieniać się w czasie. Ta cecha zależnej od czasu teorii funkcjonału gęstości okazała się kluczowa dla uchwycenia mikroskopowych mechanizmów odpowiedzialnych za konwersję energii przepływu w ciepło w wyniku turbulentnej dynamiki.

27 Makoto Tsubota, Michikazu Kobayashi, and Hiromitsu Takeuchi, "Quantum hydrodynamics," *Physics Reports* 522, 191–238 (2013).

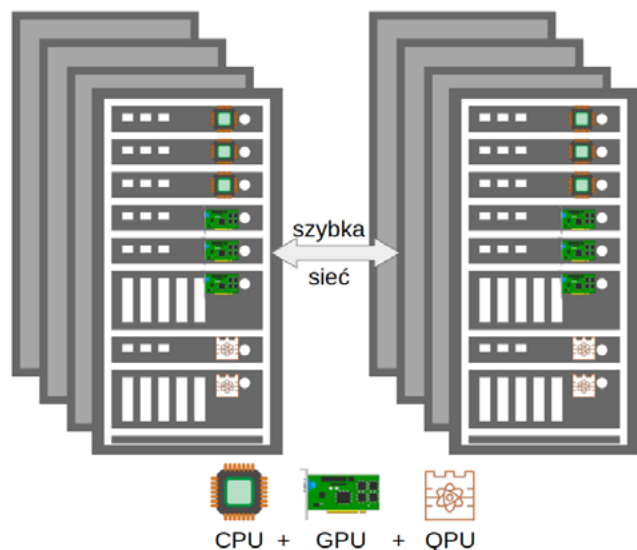
28 Gabriel Włazłowski, Michael McNeil Forbes, Saptarshi Rajan Sarkar, Andreas Marek, and Maciej Szpin-dler, "Fermionic quantum turbulence: Pushing the limits of high-performance computing," *PNAS Nexus* 3 (2024), 10.1093/pnasnexus/pgae160.

29 Gabriel Włazłowski, Michael McNeil Forbes, Saptarshi Rajan Sarkar, Andreas Marek, and Maciej Szpin-dler, "Fermionic quantum turbulence: Pushing the limits of high-performance computing," *PNAS Nexus* 3 (2024), 10.1093/pnasnexus/pgae160.



Rys. 6. Czasowa ewolucja wirów kwantowych w silnie oddziałującym nadciekłym gazie Fermiego składającego się z około 26 tysięcy atomów. Linie przedstawiają położenia rdzeni wirów kwantowych, natomiast izopowierzchnie umożliwiają wizualizację ich struktury i rozmiaru. Początkowo wiry ułożone są w regularną strukturę (a). W wyniku oddziaływań pomiędzy nimi układ ulega destabilizacji, a wiry splatają się ze sobą (b). W dalszej ewolucji całkowita długość linii wirowych stopniowo maleje (c–e) przy jednoczesnym generowaniu wzbudzeń wewnętrznych w rdzeniach wirów. Proces ten można interpretować jako efektywną zamianę energii zawartej w przepływach w ciepło.

Rysunek przedrukowany z publikacji G. Włazłowski et al., "Fermionic quantum turbulence: Pushing the limits of high-performance computing," *PNAS Nexus* 3 (2024), 10.1093/pnasnexus/pgae160, licencja CC-BY 4.0.



Rys. 7. Schemat architektury przyszłego superkomputera składającego się z klasycznych jednostek obliczeniowych typu CPU (*Central Processing Unit*), akceleratorów GPU (*Graphics Processing Unit*) oraz procesorów kwantowych QPU (*Quantum Processing Unit*), połączonych ze sobą szybką siecią komunikacyjną.

Rysunek na podstawie pracy Amr Elsharkawy et al., "Integration of quantum accelerators with high performance computing – a review of quantum programming tools," *ACM Trans. Quantum Comput.* 6, 1–46 (2025), doi: 10.1145/3743149 licencja CC-BY 4.0, modyfikacja własna.

W KIERUNKU (SUPER)KOMPUTERÓW KWANTOWYCH

Budowa komputera kwantowego stanowi obecnie jedno z najintensywniej badanych zagadnień współczesnej fizyki i techniki. Komputery kwantowe wprowadzają zupełnie nowy paradygmat wykonywania obliczeń. W komputerze klasycznym wszystkie operacje sprowadzają się ostatecznie do manipulacji bitami, czyli elementami, które mogą przyjmować jedną z dwóch wartości, zazwyczaj oznaczanych jako 0 lub 1. Bit może pozostać w swoim stanie lub zostać przełączony na stan przeciwny. W komputerze kwantowym analogiczną rolę pełnią kubity. Są to obiekty kwantowe, które, podobnie jak bity klasyczne, mogą znajdować się w stanie 0 lub 1, ale dodatkowo mogą występować w stanie superpozycji, czyli jednoczesnej kombinacji obu tych stanów (z określonymi amplitudami prawdopodobieństwa). Drugą kluczową cechą komputerów kwantowych jest możliwość wykorzystania zjawiska splątania. Jeżeli dwa kubity są splątane, to operacje wykonywane na jednym z nich (w szczególności pomiar) wpływają również na stan drugiego. Umożliwia to wykorzystanie tzw. paralelizmu kwantowego: w silnie splątanym rejestrze kubitowym operacja wykonana lokalnie oddziałuje na cały układ. Tego rodzaju mechanizmu nie posiada komputer klasyczny, w którym operacje wykonywane są sekwencyjnie na poszczególnych bitach, a zmiana jednego z nich nie wpływa automatycznie na pozostałe.

Zarówno ilość informacji przechowywanej w rejestrze kubitowym, jak i potencjalna moc obliczeniowa komputera kwantowego rosną wykładniczo wraz z liczbą kubitów. Z tego powodu komputery kwantowe postrzegane są jako narzędzie, które może w przyszłości zrewolucjonizować fizykę obliczeniową. W szczególności wydają się one naturalnym kandydatem do rozwiązywania problemów, których złożoność również rośnie wykładniczo, takich jak rozwiązywanie wielociałowego równania Schrödingera. Ten wniosek ma charakter intuicyjny: trudność tego równania wynika z fundamentalnych praw mechaniki kwantowej, a komputer kwantowy właśnie na tych prawach opiera swoje działanie.

Choć koncepcja komputera kwantowego jest dyskutowana w środowisku naukowym od lat osiemdziesiątych XX wieku, jej praktyczna realizacja pozostaje niezwykle trudnym przedsięwzięciem. Sama obserwacja i izolacja zjawisk kwantowych stanowi poważne wyzwanie, a w przypadku komputerów kwantowych dochodzi kolejny poziom trudności: precyzyjna kontrola tych zjawisk. Z tego powodu nie należy oczekiwać, że komputery kwantowe staną się w dającej się przewidzieć przyszłości niewielkimi, przenośnymi urządzeniami porównywalnymi z komputerami osobistymi. Przeciwnie: będą to złożone systemy wymagające specjalistycznej infrastruktury, podobnie jak współczesne superkomputery, które lokalizowane są w wyspecjalizowanych centrach obliczeniowych.

Projektowanie algorytmów dla komputerów kwantowych znacząco różni się od podejścia znanego z obliczeń klasycznych. Dotychczas zaproponowane algorytmy kwantowe mają zazwyczaj charakter wyspecjalizowany i są przeznaczone do rozwiązywania określonych klas problemów. Najbardziej znanym przykładem jest algorytm Shora^[30] umożliwiający rozkład liczby na czynniki pierwsze. Współczesna kryptografia opiera się na założeniu, że taki rozkład jest dla komputerów klasycznych obliczeniowo bardzo kosztowny, zwłaszcza dla liczb o ogromnych rozmiarach. Z tego powodu często podkreśla się, że komputery kwantowe mogą w przyszłości zrewolucjonizować kryptografię. Istotnym, choć rzadziej akcentowanym faktem jest to, że algorytm Shora ma charakter algorytmu hybrydowego. Część obliczeń wykonywana jest na komputerze klasycznym, natomiast jedynie najbardziej kosztowny fragment realizowany jest na komputerze kwantowym. Podobny schemat występuje w wielu innych algorytmach, takich jak *Variational Quantum Eigensolver*^[31] stosowany do rozwiązywania problemów minimalizacji funkcji. W praktyce większość współczesnych algorytmów kwantowych można opisać schematem:

1. klasyczna redukcja problemu,
2. kwantowe podzadanie,
3. klasyczny postprocessing.

Z tej perspektywy wyraźnie widać, że komputery kwantowe nie będą funkcjonować jako samodzielne urządzenia, lecz staną się jednym z elementów przyszłych większych urządzeń. Analogicznie do rewolucji architektonicznej superkomputerów, jaka dokonała się w ostatnich dekadach, tj. przejścia od systemów opartych wyłącznie na CPU do architektury CPU+GPU, w przyszłości spodziewany jest rozwój systemów typu CPU+GPU+QPU, gdzie QPU to kwantowa jednostka obliczeniowa (ang. *Quantum Processing Unit*), zobacz rys. 7. W takich systemach poszczególne etapy obliczeń będą realizowane przez najbardziej efektywne jednostki w danym kontekście. Przyszły superkomputer stanie się zatem zintegrowaną platformą obliczeniową, w której komputer kwantowy będzie pełnił rolę wyspecjalizowanego akceleratora uzupełniającego klasyczne zasoby obliczeniowe, a nie ich bezpośrednim zastępstwem.

Taka architektura nie jest jedynie wizją przyszłości, lecz koncepcją aktywnie rozwijaną już dziś^[32]. Przykładowo, europejski projekt HPCQS realizowany w ramach inicjatywy EuroHPC ma na celu integrację technologii kwantowych

30 Peter W. Shor, "Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer," *SIAM Journal on Computing* 26, 1484–1509 (1997).

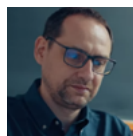
31 Jules Tilly, Hongxiang Chen, et al., "The variational quantum eigensolver: A review of methods and best practices," *Physics Reports* 986, 1–128 (2022).

32 Amr Elsharkawy et al., "Integration of quantum accelerators with high performance computing – a review of quantum programming tools," *ACM Trans. Quantum Comput.* 6, 1–46 (2025).

z istniejącymi superkomputerami. Również duże firmy technologiczne, takie jak AMD czy NVIDIA, prowadzą intensywne prace nad połączeniem klasycznych i kwantowych jednostek obliczeniowych w jeden spójny ekosystem. Przykładem takiego podejścia jest superkomputer LUMI, wspomniany na początku artykułu, który już posiada dedykowaną partycję kwantową LUMI-Q. Fizycznie komputer kwantowy tej partycji zlokalizowany jest w Ostrawie (Czechy) i oparty na technologii nadprzewodzących kubitów. Choć liczba jego kubitów nie jest imponująca (dysponuje on 24 kubitami), a zastosowany model zdalnego połączenia pomiędzy superkomputerem w Finlandii a komputerem kwantowym w Czechach nie zapewnia bardzo niskich opóźnień, nie to stanowi istotę tego przedsięwzięcia. Kluczowym celem jest stworzenie spójnego ekosystemu programistycznego, który umożliwi płynne łączenie obliczeń klasycznych i kwantowych w ramach jednej infrastruktury obliczeniowej.

Podsumowując, fizyka obliczeniowa stoi dziś u progu kolejnej transformacji. Integracja superkomputerów z technologiami kwantowymi otwiera nowe możliwości badawcze, które w nadchodzących dekadach mogą prowadzić do jakościowo nowych odkryć w fizyce, chemii i naukach o materii. Choć wiele problemów wciąż pozostaje nierozwiązanych, kierunek rozwoju jest jasny: przyszłość obliczeń naukowych będzie czerpała swoją siłę z różnorodności rozwiązań technologicznych.

AUTOR



Dr hab. inż. Gabriel Wlazłowski (ORCID: 0000-0002-7726-5328) jest profesorem na Wydziale Fizyki Politechniki Warszawskiej. Zajmuje się naukowo badaniami numerycznymi nadciekłych fermionów i zjawisk kwantowych od gazów ultrazimnych po gwiazdy neutronowe.

W SKRÓCIE

Współczesna fizyka coraz częściej rozwija się nie tylko w laboratoriach, ale także w pamięci superkomputerów. Takie maszyny pozwalają badać zjawiska, których nie da się zobaczyć bezpośrednio - na przykład zachowanie atomów, cząstek i całych układów kwantowych. Superkomputery nie są większymi komputerami, lecz ogromnymi systemami złożonymi z wielu współpracujących procesorów (CPU) i akceleratorów graficznych (GPU), które potrafią wspólnie rozwiązywać jeden bardzo trudny problem. Dzięki temu fizyka obliczeniowa stała się dziś trzecim filarem nauki obok teorii i eksperymentu. Pozwala ona modelować zjawiska zachodzące w warunkach niedostępnych dla człowieka, takich jak wnętrza gwiazd neutronowych, zmiany klimatu czy skomplikowane procesy kwantowe.

Jednym z największych wyzwań współczesnej fizyki jest opis układów złożonych z wielu cząstek. W mechanice kwantowej pełny opis takiego układu daje funkcja falowa, ale jej złożoność rośnie bardzo szybko wraz z liczbą cząstek. Oznacza to, że nawet superkomputery szybko napotykają granicę swoich możliwości. Dlatego naukowcy szukają sprytniejszych metod obliczeń. Jednym z najskuteczniejszych i obecnie najpopularniejszych sposobów poradzenia sobie ze złożonością opisywanego układu jest teoria funkcjonału gęstości, czyli DFT (ang. Density Functional Theory). Jej sedno tkwi w tym, że zamiast śledzić szczegółowo zachowanie każdej cząstki osobno, opisuje się gęstość całego układu. To ogromnie upraszcza problem i pozwala badać dużo większe układy niż w metodach bezpośrednio rozwiązujących równanie Schrödingera. Dzięki temu DFT stała się jedną z najważniejszych metod współczesnej fizyki i chemii obliczeniowej.

Szczególnie interesujące są układy nadprzewodzące i nadciekłe. W nadprzewodnikach prąd może płynąć bez oporu, a w nadcieczkach ciecz może poruszać się bez lepkości. Są to zjawiska bardzo niezwykle, bo pokazują, że materia w pewnych warunkach zachowuje się zupełnie inaczej niż na co dzień. Aby je opisać, trzeba rozszerzyć zwykłą teorię funkcjonału gęstości o dodatkowe elementy związane z parowaniem cząstek i zjawiskami kolektywnymi. Problem staje się wtedy jeszcze trudniejszy, ponieważ trzeba śledzić ewolucję ogromnej liczby wzajemnie powiązanych równań. Dopiero rozwój nowoczesnych superkomputerów sprawił, że takie obliczenia stały się praktycznie możliwe i można dziś symulować dynamiczne procesy zachodzące w nadprzewodnikach oraz ultrazimnych gazach atomowych.

Jednym z najbardziej złożonych zjawisk badanych w ten sposób jest turbulencja kwantowa. W zwykłych cieczach turbulencja kojarzy się z chaotycznym ruchem i zawirowaniami, które prowadzą do strat energii. Można by sądzić, że w nadcieczce, która nie ma lepkości, takie straty nie powinny występować. Okazuje się jednak, że również tam pojawia się chaotyczna dynamika związana z istnieniem wirów kwantowych. Są to szczególne struktury o bardzo uporządkowanej, kwantowej naturze. Ich oddziaływania, splątanie i zmiany kształtu prowadzą do zaniku uporządkowanego przepływu i zamiany energii ruchu na wzbudzenia wewnętrzne, które można porównać do ciepła. Dzięki wielkim symulacjom udało się pokazać ten proces z niespotykaną wcześniej dokładnością i lepiej zrozumieć, jak energia rozprasza się w układach kwantowych.

Na koniec warto zwrócić uwagę na przyszłość takich badań. Coraz częściej mówi się o komputerach kwantowych, które wykorzystują kubity zamiast zwykłych bitów. Kubity mogą istnieć w superpozycji stanów i być ze sobą splątane, co daje zupełnie nowe możliwości obliczeniowe. Nie oznacza to jednak, że komputery kwantowe zastąpią tak po prostu klasyczne superkomputery. Bardziej prawdopodobne jest to, że staną się ich częścią, obok tradycyjnych procesorów i akceleratorów graficznych. Przyszłość nauki obliczeniowej będzie więc prawdopodobnie polegała na łączeniu różnych technologii w jednym systemie.