
Физика

УДК 530.145

Реализации эвристики коллективного поведения в квантовой динамике многих тел

Н. Б. Викторова*, Ю. И. Ожигов†

* *Кафедра нелинейного анализа и оптимизации
Российский университет дружбы народов
ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Москва, 117198, Россия*

† *Кафедра квантовой информатики
Московский государственный университет
Ленинские горы, МГУ, д. 1, стр. 52, ВМК, 119991, Москва, ГСП-1, Россия*

В статье показаны пути построения алгоритмов моделирования динамики систем многих тел на основе эвристики коллективного поведения, включающие метод Фейнмана интегралов по путям, метод Боба и метод динамического диффузионного роа. Обсуждаются достоинства и недостатки этих методов.

Ключевые слова: квантовый компьютер, декогерентность.

1. Эвристика коллективного поведения в квантовой теории многих тел

Главная проблема квантовой теории многих тел состоит в экспоненциальном росте размерности гильбертова пространства состояний системы с ростом числа частиц. Эта проблема была осознана Р. Фейнманом, который в 80-х годах XX в. выдвинул идею квантового компьютера для моделирования сложных систем с квантовыми эффектами. Однако дальнейшее развитие физики квантовых компьютеров, включающее эксперименты в рамках наиболее продвинутых технологий: ловушек Пауля для холодных металлических ионов, сверхпроводящих переходов Джозефсона и квантовых точек в гетероструктурах, показало фундаментальную роль декогерентности. Например, согласно известным результатам Р. Стина, Д. Лафлама и др. (см. [1]), коды коррекции квантовых ошибок начинают работать с уровня ошибок не более 10^{-5} , и потому мы должны иметь возможность производить практические безошибочные квантовые вычисления на нескольких тысячах квантовых битов, не используя такие коды.

Стало понятно, что декогерентность нельзя рассматривать как своеобразную силу трения, которую можно «отключить»; надо представлять её как встроенное свойство квантовой системы и моделировать её поведение, включающее как унитарную динамику, так и спонтанные измерения. Для моделирования квантовой динамики с использованием существующих типов вычислительной техники необходимы специальные программные средства, которые невозможно получить, совершенствуя существующие вычислительные методы теории дифференциальных уравнений. Такие методы называют прямым моделированием; эвристику коллективного поведения для такого моделирования мы опишем в этой статье. Она называется эвристикой коллективного поведения и исходит из того, что точечная квантовая частица представляется в виде роа (ансамбля) своих точечных экземпляров. Ансамбль n реальных частиц тогда представляется в виде кортежей вида s_1, s_2, \dots, s_n , где $\forall j = 1, 2, \dots, n$ s_j есть экземпляр j -й частицы. Можно потребовать, чтобы такие кортежи не пересекались, тогда сложность модели будет расти линейно с ростом числа частиц, так что отклонение эволюции такого роа от точного решения уравнения Шрёдингера будет экспоненциально расти с ростом n . Это и есть представление декогерентности в эвристике коллективного поведения.

Статья поступила в редакцию 10 апреля 2010 г.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант N 09-01-00347-а.

Опишем три способа реализации такой эвристики: дискретная версия фейнмановских интегралов по путям [2], бомовский подход с псевдопотенциалом и динамический диффузионный рой [3, 4].

2. Дискретная версия интегралов по путям

Будем рассматривать каждый экземпляр как носитель некоторой малой квантовой амплитуды, которая преобразуется при полете по правилу Дирака на основе своего действия, а на каждом шаге амплитуды всех близких экземпляров складываются, формируя волновую функцию.

Было бы логично рассматривать каждый экземпляр как неуничтожимый, то есть приписывать каждому экземпляру частицы её собственную историю. Вернёмся к этому тезису позже. А пока будем считать экземпляры лишь вспомогательным инструментом для описания волновой функции Ψ , и заново переопределять эти экземпляры через короткий промежуток времени δt , исходя из волновой функции $\Psi(t)$. Такой рой мы называем волновым в знак того, что у его экземпляров будет история, только ограниченная длительностью времени δt . Наша схема тогда будет выглядеть как итерация трёх основных шагов:

- расчёт волновой функции на основе состояния всех экземпляров волнового роя;
- новое определение экземпляров волнового роя;
- свободный полет экземпляров и изменение их амплитуд.

Можем определить все три пункта шага эволюции волнового роя. Вычисление волновой функции в данной точке есть суммирование амплитуд всех экземпляров роя, попавших в некоторый куб в центре в данной точке. Переопределение экземпляров волнового роя сводится к тому, чтобы разбить значение волновой функции в данном кубике на много одинаковых частей, то есть представить в виде $n\alpha$, где натуральное n велико, и создать n новых экземпляров, при этом приписав каждому из этих экземпляров случайную скорость из равномерного распределения в некотором большом кубе. Наконец, свободный полет экземпляров осуществляется по закону Галилея, причём амплитуды каждого при этом полете умножаются на $e^{-\frac{i\Delta S}{\hbar}}$, где ΔS есть действие этого экземпляра вдоль прямолинейной траектории при фиксированном времени δt его полёта. Из соображений упрощения вычислений можно считать, что α для всех точек одинаково, а $n = n(x)$ пропорционально $|\Psi(x)|$ в данной точке x .

3. Метод Бома

Опишем метод Бома, который основан на понятии псевдопотенциала. Будем отождествлять квадрат модуля волновой функции с плотностью ансамбля воображаемых частиц, а её фазу φ — с классическим действием. Тогда мы имеем: $\Psi = \rho^{1/2} e^{i\varphi/\hbar}$, и $1/m \text{grad } \varphi(\vec{r})$ можно рассматривать как плотность потока воображаемых частиц. Тогда уравнение Шрёдингера будет эквивалентно системе таких уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} (\rho/m \text{grad } \varphi) &= 0, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\text{grad } \varphi)^2 + V + V_1 &= 0, \end{aligned}$$

где квантовый псевдопотенциал $V_1 = \frac{\hbar^2}{m} (\Delta \rho / \rho + (\text{grad } \rho)^2 / \rho^2)$ зависит от плотности самих частиц, причём с сингулярностью в нуле. Эти уравнения совпадают с уравнениями динамики потока классических частиц, если предположить, что V_1 имеет физический смысл некоего потенциала. Бомовский подход содержит один серьёзный недостаток. Неясен механизм попарного взаимодействия между воображаемыми частицами, который может дать такой псевдопотенциал.

4. Динамический диффузионный рой

Динамический диффузионный рой основан на идее градиентного действия роя, представляющего своеобразный потенциал. Механизм перемещения экземпляров в динамическом диффузионном рое таков.

- Скорость каждого экземпляра получает ускорение, равное $(-I\nabla\rho/\rho - \kappa\rho\nabla V)dt$ где V — внешний потенциал, $\rho = N/N_j(dx)^3$ — плотность роя (N — общее число экземпляров, N_j — их число в малом кубике в окрестности рассматриваемой точки, $I = \frac{h^2}{m(dx)^3}$, $\kappa = \frac{h}{m dx}$ — константы, dx и dt выбранные зерна пространственного и временного разрешения соответственно.
- Скорость всех экземпляров роя получает приращение $-\nabla V dt$.
- Происходит свободный полет всех экземпляров роя.
- Происходит усреднение скоростей всех экземпляров, расположенных в одной клетке пространства.
- Происходит сглаживание роя для подготовки следующего цикла.

Из определения механизма ДДР вытекает, что мы не можем устремить dx к нулю для получения дифференциальных уравнений для ДДР так, как это делается в методе Бома. Но главное достоинство метода динамической диффузии — линейный рост сложности, делает этот метод самым эффективным в моделировании квантовой динамики многих частиц.

Литература

1. Валиев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. — М.–Ижевск: РХД, 2001. [Valiev K. A., Kokin A. A. Kvantovihe kompjuuterih: nadezhdi i realnostj. — M.–Izhevsk: RKhD, 2001.]
2. Feynman R., Hibbs A. Quantum Mechanics and Path Integrals. — NY: McGraw-Hill Book Company, 1965.
3. Ozhigov A., Arakelov K., Ozhigov Y. Principles of Numerical Simulation of Many Body Quantum Dynamics // Quantum Computers and Computing. — 2006. — Vol. 6, No 1. — Pp. 137–148.
4. Semenihin I., Ozhigov Y. Algorithmic Approach to Quantum Physics I and II // Proceedings of SPIE, Quantum Informatics. — 2005. — P. 6264. — Modified version in Vestnik MGU, ser. Mat. — 2006. — Vol. 4. — Pp. 42–48.

UDC 530.145

Realization of Collective Behavior Heuristic in Quantum Dynamics of Many Bodies

N. B. Victorova, Y. I. Ozhigov

* Department of Optimization and Nonlinear Analysis
Peoples' Friendship University of Russia
6, Miklukho-Maklaya str., 117198, Moscow, Russia

† Department of Quantum Informatics
Moscow State University of M. V. Lomonosov
1-52, Leninskiye Gory, 119991, Moscow, GSP-1, Russia

We describe the ways of constructing algorithms for the simulation of many bodies dynamics through the heuristic of collective behavior, including Feynman path integrals, Bohm approach and the method of dynamic diffusion swarm. We discuss the advantages and drawbacks of these methods.

Key words and phrases: quantum computer, decoherence.