УДК 519.214, 519.673

А. Н. Бондаренко, В. А. Дедок

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕАДАМАРОВСКОГО КВАНТОВОГО БЛУЖДАНИЯ ДЛЯ РЕШЕТОК ВЫСШИХ РАЗМЕРНОСТЕЙ*

Методом компьютерного моделирования исследованы асимптотические свойства вероятности возвращения в модели квантового случайного блуждания на решетках разных размерностей. Результаты численных экспериментов позволяют сформулировать гипотезы локализации на двумерной решетке для модели неадамаровского блуждания с различными эволюционными матрицами.

Ключевые слова: квантовое случайное блуждание, вероятность возвращения.

Модель квантового случайного блуждания активно изучается в последнее десятилетие в связи с возможным применением ее результатов в теории квантовых вычислений и ускорении алгоритмов, основанных на случайном блуждании. Более того, указанная модель имеет неожиданные приложения в теории прямых и обратных задач рассеяния [1].

Одномерное квантовое случайное блуждание. Прежде чем определить дискретное квантовое блуждание, опишем классический случай [2]. Симметричное классическое блуждание может быть реализовано следующим образом. Частица начинает движение, например, из начала координат, на каждом шагу подбрасывая монетку, она равновероятно выбирает направление движения. Затем она делает один шаг в выбранном направлении и т. д.

В более общем случае, когда частица выбирает направление не равновероятно, а с вероятностями p и $q = 1 - p$, вероятность нахождения классической блуждающей частицы в момент времени $t+1$ в ячейке с номером n выглядит следующим образом:

$$P_n(t+1) = pP_{n+1}(t) + qP_{n-1}(t). \qquad (1)$$

Тем самым, задав распределение вероятностей нахождения классической блуждающей частицы в начальный момент времени, можно вычислить распределение вероятностей для любого наперед заданного момента времени t.

Квантовое обобщение случайного блуждания [3] рассматривает квантовую частицу, обладающую дополнительной степенью свободы, и характеризуется двукомпонентной волновой функцией

$$\Psi(n,t) = \begin{bmatrix} \psi_L(n,t) \\ \psi_R(n,t) \end{bmatrix}$$

амплитуд в ячейке с номером n во время t. Поведение во времени функции $\Psi(n,t)$ задается унитарным преобразованием.

Определение 1. *Адамаровское случайное блуждание* – это случайное блуждание, задаваемое правилом

$$\Psi(n,t+1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \Psi(n-1,t) + \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Psi(n+1,t) = $$
$$= M_{-}\Psi(n-1,t) + M_{+}\Psi(n+1,t).$$

Вероятность нахождения квантовой частицы в узле с номером n в момент времени t выражается следующей формулой:

$$P(n,t) = |\psi_L(n,t)|^2 + |\psi_R(n,t)|^2.$$

Если частица начинает свое движение из начала координат с исходным состоянием «влево», то начальные условия будут выглядеть следующим образом:

$$\Psi(0,0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \Psi(n,0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, n \neq 0,$$

и адамаровское квантовое случайное блуждание станет сводиться к решению двумерной системы уравнений в конечных разностях.

В общем случае характеристики квантового случайного блуждания (унитарного преобразования над волновой функцией) зависят от четырех параметров. Однако, как было отмечено в [3], достаточно рассмотреть зависимость от одного параметра, характеризующего семейства блужданий. Таким образом, общее случайное блуждание может быть описано следующим преобразованием:

$$M(\theta) = T \circ (I \otimes U_\theta),$$

где $U_\theta = e^{i\frac{\theta}{2}\sigma_y}$.

Оператор $M(\theta)$ описывает эволюцию блуждания: $\Psi(t+1) = M(\theta)\Psi(t)$. Адамаровское случайное блуждание соответствует значению параметра $\theta = \pi/2$:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = -i\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = -ie^{i\frac{\pi}{2}\sigma_z}U_{\frac{\pi}{2}},$$

где дополнительное вращение может быть нивелировано подходящим переопределением фазы состояния.

*Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 08-01-00312).

В более удобном для использования виде эволюция квантового блуждания может быть записана как

$$\Psi(n,t+1)=\begin{pmatrix}0 & 0\\ \sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}\Psi(n-1,t)+ \\ +\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}\\ 0 & 0\end{pmatrix}\Psi(n+1,t). \quad (2)$$

Используя выражение для волновой функции (2), можно вычислить распределение вероятностей нахождения квантовой частицы для различных начальных состояний частицы и различных значений параметра θ.

Результаты расчетов для вероятности возвращения квантовой частицы даже для не очень большого числа шагов, приведенные на рис. 1, позволяют сделать вывод, что распределение вероятностей нахождения квантовой частицы в заданной точке достаточно сильно зависит как от начального состояния частицы, так и от параметра θ.

Здесь и далее нас будет интересовать такая характеристика, как вероятность возвращения квантовой блуждающей частицы в исходную точку за t шагов по времени, а также асимптотические свойства этой характеристики. Интерес к данному показателю обусловлен связью вероятности возвращения и свойства локализации [1].

Возвратные марковские цепи. Локализация в модели квантового блуждания. В теории классических цепей Маркова большое внимание уделяется возвратным состояниям. Рассмотрим цепь Маркова $\{X_n\}_{n=0}^{\infty}$. Если в n-м испытании реализовалось событие E_j, то будем считать, что $X_n=j$. Введем следующие обозначения:

$$f_j(n)=P\left(X_n=j,X_{n-1}\neq j,...,X_1\neq j\mid X_0=j\right),$$

$$F_j=\sum_{n=0}^{\infty}f_j(n).$$

Определение 2. Состояние E_j называется *возвратным*, если $F_j=1$, и *невозвратным*, если $F_j<1$.

Пусть $p_{ij}=P\left(X_k=j\mid X_0=i\right)$. Важным способом проверки возвратности является следующая теорема [2].

Теорема 1. Состояние E_j возвратно тогда и только тогда, когда $\sum_{j=1}^{\infty}p_{jj}=\infty$.

Численно исследуя асимптотические свойства убывания членов ряда p_{jj}, можно сделать выводы о его сходимости или расходимости, а следовательно, и выводы о возвратности цепи Маркова.

В случае классического случайного блуждания имеет место следующая теорема [2].

Теорема 2. Описанное случайное блуждание образует возвратную цепь Маркова тогда и только тогда, когда $p=q=\frac{1}{2}$.

По аналогии с вышеприведенными рассуждениями и определением локализации в моделях, рассматриваемых в [4], можно определить следующие понятия.

Определение 3. Квантовое случайное блуждание называется *локализованным*, если $\lim_{n\to\infty}p_r(n)>0$, где $p_r(n)=P(0,n)$ – вероятность возвращения квантовой частицы в начальную точку за n шагов.

Определение 4. Квантовое случайное блуждание называется *слабо локализованным*, если $\sum_{n=0}^{\infty}p_r(n)=\infty$.

Свойство возвратности одномерного квантового блуждания достаточно подробно описано в работе [1] и представлено следующей теоремой.

Теорема 3 (одномерная квантовая теорема Пойа). Пусть $\theta=0$, тогда квантовое блуждание на прямой с любым начальным состоянием не возвратно. Пусть $0<\theta<\pi$, тогда квантовое блуждание на прямой с любым начальным состоянием возвратно (слабо локализовано). При этом главный член асимптотики не зависит от начального состояния. Пусть $\theta=\pi$, тогда квантовое блуждание на прямой с любым начальным состоянием возвратно (слабо локализовано). При этом $P_0(n,t)=0$ при $|n|\geq 2$.

Квантовое случайное блуждание высших размерностей. Одномерное классическое блуждание на прямой описывается эволюционным уравнением для вероятности нахождения в точках с целыми координатами (1). Аналогичное уравнение, но уже зависящее от четырех параметров, имеет место для классического блуждания по точкам с целыми координатами на плоскости (а в общем случае – и для блуждания по точкам с целыми координатами в пространстве размерности n):

$$P_{x,y}(t+1)=p_1P_{x+1,y}(t)+p_2P_{x-1,y}(t)+ \\ +p_3P_{x,y+1}(t)+p_4P_{x,y-1}(t).$$

Вероятности p_i соответствуют вероятности классической частицы совершить шаг вправо, влево, вверх и вниз. Для квантового случайного блуждания роль вероятностей играют матрицы $P=M_+$ и $Q=M_-$.

Соответствующее уравнение для амплитуд вероятностей выглядит следующим образом:

$$\Psi(n,t+1)=P\Psi(n+1,t)+Q\Psi(n-1,t).$$

Множество начальных состояний квантовой частицы имеет вид

$$\Phi=\left\{\varphi=\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}\in C^2:|\alpha|^2+|\beta|^2=1\right\}.$$

Матрица преобразования для одномерного адамаровского блуждания будет такой:

$$H=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}.$$

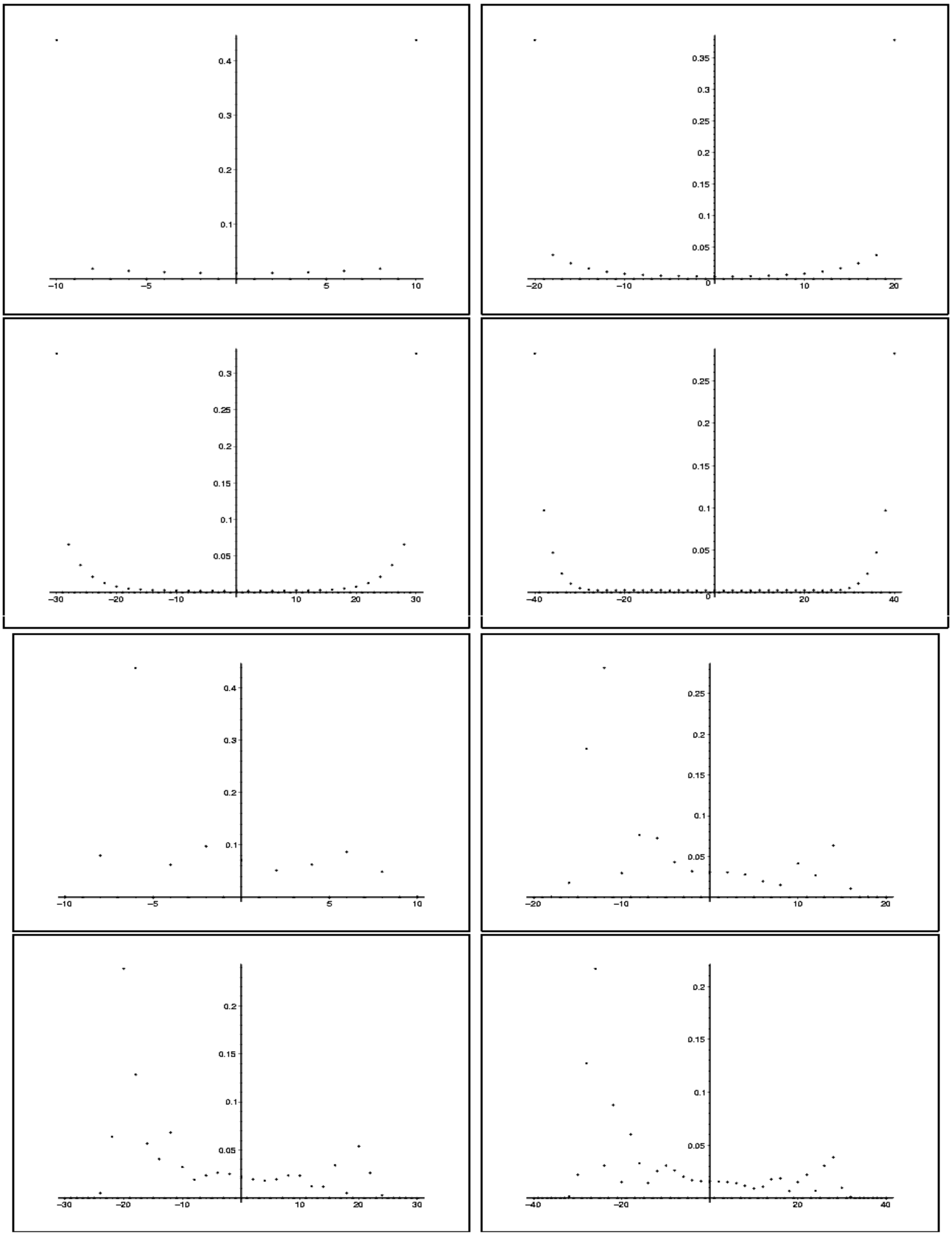

Рис. 1. Распределение вероятностей возвращения для блуждающей квантовой частицы:

верхние четыре рисунка – $\theta = \frac{\pi}{13}$, $\Psi(0,0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$, число шагов по времени 50, 100, 150, 200;

нижние четыре рисунка – $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\Psi(0,0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, число шагов по времени 50, 100, 150, 200

Обобщение квантового случайного блуждания на многомерный случай определяется матрицами большей размерности [5]:

$$H_d = H \otimes H \underset{d}{\otimes} \ldots \otimes H,$$

являющимися тензорным произведением матриц одномерного случайного блуждания. В этом случае множество начальных состояний квантовой частицы выглядит как

$$\Phi^{(d)} = \{\varphi_1 \otimes \varphi_2 \otimes \ldots \otimes \varphi_d : \varphi_i \in \Phi, i = 1, 2, \ldots, d\}.$$

Определение 5. *Двумерным адамаровским случайным блужданием* называется блуждание, описываемое матрицей

$$H_{\mathrm{H}} = H_1 = H \otimes H = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Вероятность нахождения квантовой частицы в соответствующем узле (n, m) определяется аналогично одномерному случаю:

$$P((n,m),t) = |\Psi_1((n,m),t)|^2 + |\Psi_2((n,m),t)|^2 +$$
$$+ |\Psi_3((n,m),t)|^2 + |\Psi_4((n,m),t)|^2 .$$

Другим примером двумерного квантового блуждания является блуждание, описываемое матрицами H_2 (Гровера) и H_3:

$$H_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad H_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Как и раньше, нас будет интересовать такая характеристика блуждания, как вероятность возвращения в исходную точку за определенное число шагов, например за 20 (рис. 2).

Сложность изучения квантового случайного блуждания обусловливается еще большим числом всевозможных конфигураций и степеней свободы по сравнению с блужданием на одномерной решетке (см. рис. 2).

Проследить асимптотические свойства вероятности возвращения в исходную точку можно на рис. 3, где изображены результаты компьютерного моделирования. Эти результаты показывают, что вероятность возвращения для блуждания с матрицами H_1 и H_3 убывает на бесконечности как $1/t^2$ и, следовательно, невозвратно.

Особенно интересным в качестве объекта численного исследования является случайное блуждание Гровера, которое имеет принципиально иной асимптотический характер вероятности возвращения в исходную точку (пропорционально t^0).

Таким образом, результаты моделирования позволяют сформулировать следующие гипотезы.

Гипотеза 1. Асимптотика вероятности возвращения квантовой частицы в начало координат не зависит от начальных условий.

Гипотеза 2. Подмножество параметров квантового блуждания, при котором оно обладает свойством возвратности при любых начальных данных, имеет меру нуль.

Библиографические ссылки

1. Бондаренко А. Н., Дедок В. А. Квантовая теорема Пойа // Сиб. электрон. мат. изв. 2009. Т. 6. С. 199–210.

2. Боровков А. А. Курс теории вероятностей. М. : Наука, 1972.

3. Nayak A., Vishwanath A. Quantum Walk on the Line (Extended Abstract) [Electronic resource] // Cornell University Library : site. URL: http://arxiv.org/pdf/quant-ph/0005106 (date of visit: 20.11.2010).

4. Ishii K. Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System // Prog. Theor. Phys. Suppl. 1973. № 53. P. 77–138.

5. Sanders Quantum walks in higher dimensions / T. D. Mackay, S. D. Bartlett, L. T. Stephanson, B. C. Sanders // J. Phys. A: Math. Gen. 2002. Vol. 35. P. 2745–2753.

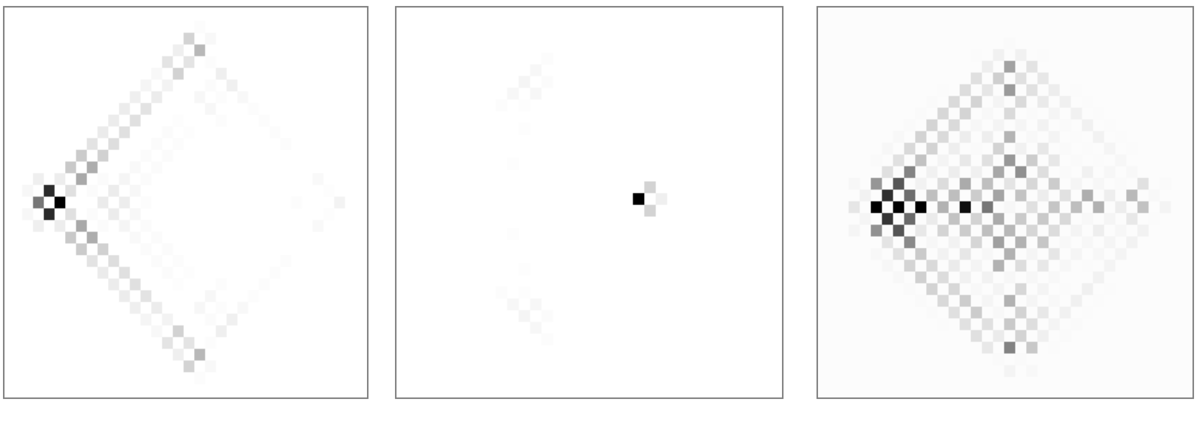

Рис. 2. Распределение вероятностей для блуждания с матрицами преобразования H_1, H_2 и H_3 за 20 шагов по времени

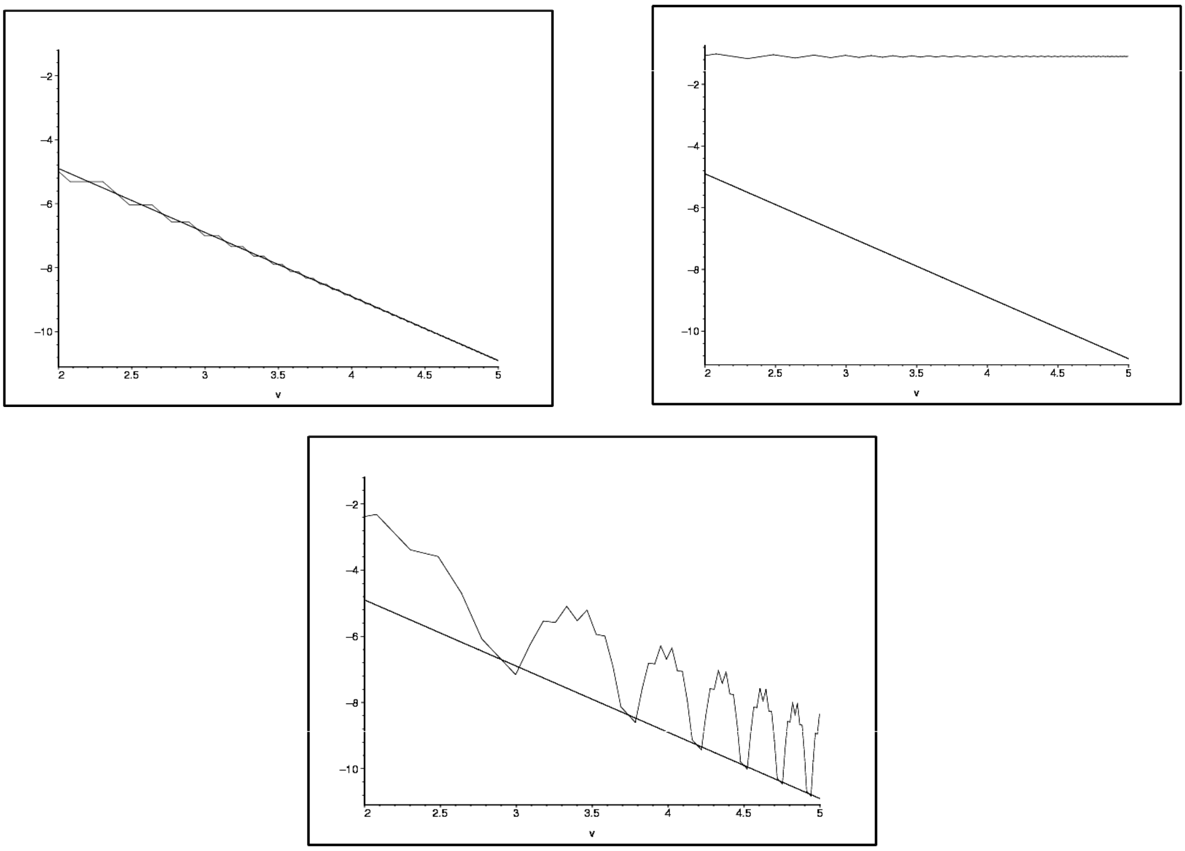

Рис. 3. Вероятность возвращения в исходную точку в логарифмическом масштабе для блужданий с матрицами H_1, H_2 и H_3 и асимптотическое приближение на бесконечности вида $1/t^2$

A. N. Bondarenko, V. A. Dedok

MODELLING OF NEADAMAROV QUANTUM WANDERING FOR GRILL GRIDS OF ADVANCED DIMENSIONS

The work is devoted to studies of asymptotic properties of probability of returning in model of quantum casual wandering on grill grids of different dimensions by a method of computer modeling. Results of numerical experiments allow to formulate localization hypotheses on a two-dimensional grill grid for model of Neadamarov wanderings with various evolutionary matrixes.

Keywords: quantum casual wandering, probability of returning.