

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ДЕКОГЕРЕНТНОСТИ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ НАНОСИСТЕМ

Ю.И. Ожигов*

Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова

ozhigov@cs.msu.su

Поступила 22.11.2012

Предлагается метод учета декогерентности в моделировании динамики нано-размерных систем, основанный на роевом представлении квантовых состояний, или эвристике коллективного поведения. Такая декогерентность связана не с влиянием внешней среды, как в моделях типа Кальдера-Леггетта, а с ограниченностью вычислительных ресурсов моделирующего компьютера. Показано, что данная модель в пределе самой жесткой декогерентности дает борновское распределение вероятностей наблюдений, а при росте числа реальных частиц дает экспоненциальное отклонение от точного решения уравнения Шредингера.

УДК 530.145

1. Введение

Компьютерное моделирование наноразмерных устройств требует применение квантовой механики к системам многих частиц, так что при росте числа реальных частиц квантовое описание переходило бы в классическое. Мы исходим из главного тезиса конструктивизма (см. книгу [2]), по которому ограничения, вытекающие из теории алгоритмов, имеет статус фундаментальных физических законов. В частности, декогерентность, являющаяся отклонением эволюции реальной системы от унитарного закона, происходит из-за ограниченности памяти моделирующего процесс классиче-

*Работа поддержана грантом РФФИ N 12-01-00475-а

ского компьютера. Из этого вытекает принципиальный недостаток подходов к моделированию на базе уравнения Шредингера: при переходе к системе n частиц эти подходы требуют времени и памяти порядка $\exp(n)$. Это вызывает интерес к развитию подходов типа бомовского, в которых с элементарными исходами измерений квантовой системы можно было бы работать напрямую, не применяя аппарат волновых функций.

Интерес к таким моделям для многих частиц возник совсем недавно, и связан с ожидаемым пессимистическим сценарием дальнейших экспериментов по построению масштабируемого квантового компьютера по схеме Дейча, Шора и ди Винченцо. Декогерентность оказалась фундаментальным фактором, для которого в рамках копенгагенской квантовой теории отсутствует формальное описание. Эксперименты с вакуумными ловушками Пауля для ионов показывают бесспорно показывают присутствие сложных запутанностей W и GHZ типов, надежно детектируемых методом квантовой томографии, но при этом сложные состояния оказываются чрезвычайно хрупкими, что приводит к гипотезе о том, что их разрушение – декогерентность – нельзя трактовать как разновидность силы трения со стороны окружения. Декогерентность правильнее трактовать как встроенный фактор эволюции квантовой системы. Такая трактовка сразу ведет нас к абсолютной модели декогерентности, которую мы сформулировали выше.

Оказывается, что модель со встроенной декогерентностью может обладать линейной сложностью при росте реальных частиц. Это дает принципиальную возможность строить модели сложных систем с многими частицами на компьютерах существующих типов, в которых можно зафиксировать роль запутанных квантовых состояний из тысяч частиц.

1.1. Приближения уравнения Шредингера квазиклассическими ансамблями: подход Боба

Метод коллективного поведения основан на идее Д.Боба о представлении квантовой частицы ансамблем точечных классических частиц, которые мы будем называть ее экземплярами, а сам ансамбль – роем. Каждый экземпляр имеет не только координаты, но и свою индивидуальную скорость. Генезис этой идеи восходит к де Бройлю, придававшему фундаментальный смысл волне, которая соответствует любой материальной частице, и имеет динамическую характеристику – скорость. Импульс роя в данной точке оказывается тогда связанным с фазой S/\hbar волновой функции соотношением $\nabla S = p$. Опираясь на это соответствие, Э.Шредингер написал свое знаменитое уравнение. Однако роевое представление квантовой частицы сталкивается со следующей фундаментальной проблемой. В уравнение Шредингера входит волновая функция Ψ , связанная с плотностью экземпляров соотношением $\rho = |\Psi|^2$, так что у нас нет, вообще говоря, прямой связи динамики с ρ . Для того, чтобы применение роя имело смысл, нам надо требовать, чтобы его плотность была пропорциональна плотности вероятности нахождения частицы в данной точке. Но тогда экземпляры должны обладать свойством сохранения во времени, то есть у каждого должна быть своя индивидуальная история. Квантовая динамика роя, состоящая из поведений каждого из экземпляров, должна приближать точное решение уравнения Шредингера на достаточно большом промежутке времени.

Проблему сохранения экземпляров и была решена Бобом, который предложил наряду с обычным внешним потенциалом $V = V(\vec{r})$ использовать так называемый

квантовый псевдо потенциал $Q = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\Delta n}{R}$, где $\Psi = R \exp(iS/\hbar)$. Тогда уравнение Шредингера с внешним потенциалом V эквивалентно двум уравнениям вида:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{p^2}{2m} + V + Q = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{1}{m} \rho p \right) = 0, \quad (1)$$

где первое есть уравнение Гамильтона–Якоби для характеристической функции S экземпляра, определенной равенствами $\nabla S = p$, $\partial S / \partial t = E$, где $p = p(\bar{r})$ ее импульс, $\rho(\bar{r}) = R^2(\bar{r})$ – плотность роя, а второе уравнение выражает свойство неразрывности роя. Этот подход называется бомовской квантовой гидродинамикой (см. [1]), так как квантовая частица здесь представляется роем классических частиц, подчиняющихся классической динамике, но их потенциал $U = V + Q$ имеет квантовую добавку Q , зависящую от плотности роя в данной точке пространства–времени.

Алгоритм, моделирующий квантовую динамику в рамках гидродинамического подхода на каждом шаге делает следующее.

- Выполняет свободный полет всех экземпляров.
- Меняет скорость каждого экземпляра по правилу $p(t + \Delta t) = p(t) - \nabla U$.

Мы видим важность вычисления плотности роя на каждом шаге, так как это требуется для вычисления U , благодаря добавке в форме квантового псевдо потенциала Q . Мы можем считать, что экземпляры просто определяют узлы разбиения конфигурационного пространства, которое является базой для применения конечно-разностного метода решения уравнений (1); значение квантовой гидродинамики будет, таким образом, ограничено возможностью ускорить решение уравнение Шредингера. Насколько значимо это преимущество квантовой гидродинамики? Рассмотрим случай многих реальных частиц, например, несколько десятков. Плотность роя тогда будет плотностью классического ансамбля в пространстве R^{3n} где n есть число реальных частиц. Для сохранения первоначальной точности приближения

$$\rho(t) \approx |\Psi(t)|^2 \quad (2)$$

решения Ψ уравнения Шредингера, нам надо выдерживать постоянный шаг разрешения по пространству, что приводит к экспоненциальному росту числа ячеек в конфигурационном пространстве. Для того, чтобы найти производные плотности (нам надо три последовательно), мы должны гарантировать, что в каждой клетке есть много экземпляров, что ведет к тем же трудностям, что и прямое решение уравнения Шредингера для n частиц. Единственная польза от квантовой гидродинамики состоит в возможности оптимизировать сетку для конечно-разностной схемы (практически по узлам находят полиномиальное приближение плотности); это преимущество интересно, но оно не решает нашей основной проблемы моделирования больших коллективов.

2. Рой с динамической диффузией

Явное рассмотрение механизма ускорения экземпляров требует выполнения законов сохранения. Если мы отказываемся от знания плотности в окрестности рассматриваемой точки – а мы должны это сделать, чтобы иметь субэкспоненциальную модель – мы должны гарантировать, выполнение законов сохранения для отдельных

экземпляров, что означает отказ от таких вещей, как квантовый псевдо потенциал. Сначала мы определим этот механизм и напишем соответствующее выражение для плотности потока экземпляров через границу между клетками; затем мы покажем, что уравнение Шредингера можно свести к этому выражению, если зафиксировать зерно пространственного разрешения. Таким образом получится, что наш механизм динамической диффузии критически зависит от этого зерна, что придает методу специфические особенности. Такие особенности являются неизбежной платой за преимущества, которые мы получим от динамической диффузии в случае многих частиц.

2.1. Механизм рождения и уничтожения связей

Мы определим эволюцию роя, которую назовем динамической диффузией, и которая будет состоять из шагов, каждый длительности Δt . Но здесь не достаточна простая схема, предложенная выше, потому что рой здесь будет существенно иной. Поэтому мы должны определить шаг эволюции заново.

На каждом шаге мы будем иметь не только экземпляры, но и так называемые симплексы. Симплекс S порядка j ($j \in N$) есть точечная частица, имеющая свои собственные координаты $\bar{r}(S)$, скорость $v(S)$, и внутренний сдвиг $sh(S)$. Одновременно, мы будем определять на каждом шаге объекты, называемые связями (bonds). Неформально говоря, симплекс есть набор экземпляров, связанных друг с другом связями, которые вращаются с очень высокой скоростью так что их кинетическая энергия велика, тогда как скорость симплекса как единого целого мала. Фактически, рой будет разделен на две фракции: отдельные экземпляры, летящие с максимальной возможной скоростью c , и симплексы порядков $j > 1$, скорость которых гораздо меньше. Это является причиной введения внутреннего сдвига: в течение некоторого времени симплекс S движется, но его сдвиг не достаточен для того, чтобы он преодолел расстояние до ближайшего узла. Как мы узнаем ниже, фиксация разбиения пространства на клетки необходима для моделирования квантовой динамики; именно из-за этого невозможно рассматривать непрерывное движение симплексов.

Для этого мы сначала определим процедуру ассоциации экземпляра s с симплексом S , имеющим порядок j . Пусть S расположен в ячейке \bar{r} , и экземпляр s только что влетел в эту ячейку. Предположим, что в течение рассматриваемого короткого промежутка времени Δt расстояние между s и S достигает своего минимума. Мы предполагаем, что время течет непрерывно; это не изменит длительность шага ввиду огромной величины частного $c/v(S)$. В тот момент, когда достигается наименьшее расстояние, мы устанавливаем абсолютно жесткую связь между s и S так, что эти объекты начинают вращаться вокруг общего центра масс, и эта пара вместе с установленной связью мы назовем симплексом ранга $j + 1$. Его скорость есть $v_1 = (v(s)m + v(S)M)/(m + M)$ где m , M есть массы s и S соответственно, что вытекает из классической динамики системы $s + S$, единственный неклассический объект здесь – это связь, которую мы установили между s и S . Мы назовем эту связь главной связью результирующего симплекса S_1 и обозначаем ее через $b(S_1)$. Заметим, что благодаря абсолютной жесткости связи, она не производит никакой работы; таким образом, энергия, импульс и момент импульса в ходе ассоциации не меняются.

Процесс уничтожения связи в точности обратен ассоциации; он дает свободный экземпляр, улетающий от симплекса, чей порядок уменьшился на единицу. Повторные q ассоциаций, начинающиеся с симплекса S дают новый симплекс S' порядка

$j + q$. Фактически, симплекс порядка j представляет собой набор последовательно вложенных симплексов, каждый из которых получается ассоциацией какого-то экземпляра с предыдущим симплексом. Последовательная диссоциация идет в обратном порядке.

Теперь мы можем определить шаг основной эволюции. Он заключается в последовательном выполнении таких действий.

- Для каждого симплекса S мы меняем $sh(S)$ на $sh(S) + v(S)\delta t$ и проверяем неравенство $sh(S) < d$ где d есть расстояние до ближайшего узла по направлению скорости симплекса vS . Если оно выполняется, мы переходим к следующей операции, если нет, мы сдвигаем S на ближайшую соседнюю ячейку и присваиваем внутреннему сдвигу нулевое значение: $sh(S) = 0$.
- Каждый симплекс получает добавку к скорости вида $b\delta t\nabla V/m$, где V есть внешний потенциал, δt есть продолжительность шага, m есть масса экземпляра, b некоторая константа.
- Из каждого симплекса S мы выбираем $[aj]$ последних экземпляров и последовательно уничтожаем связи, соединяющие их с соответствующими вложенными симплексами; называем эти экземпляры принадлежащими тонкому слою и производим их полет до ближайшего соседнего симплекса с их скоростями, где j есть порядок данного симплекса, a – некоторая константа $a \ll 1$.
- При достижении каждым экземпляром тонкого слоя ближайшего симплекса мы производим ассоциацию его с соответствующим симплексом и переопределяем их скорости в соответствии с законом ассоциации.

Мы назовем эффект от уничтожения связей взрывом пиков, потому что это выглядит как взрыв симплекса, при котором его внутренняя энергия – кинетическая энергия вращающихся внутри симплекса экземпляров – превращается в кинетическую энергию вылетевших экземпляров, тех, которые вошли в тонкий слой. Третий пункт говорит о том, что эти экземпляры сразу же поглощаются соседними симплексами; их кинетическая энергия и импульс таким образом захватываются этими симплексами. Взрыв пиков и образование тонкого слоя похоже на образование газообразной фракции из жидкости; движение же самих симплексов аналогично потоку самой жидкости. Первый и второй пункты устанавливают правила фазового перехода: из жидкой фазы в газообразную и наоборот. Скорость газообразной фракции намного больше, чем жидкой; это выражает нерелятивистский характер рассматриваемой динамики:

$$v_{symp} \ll c. \quad (3)$$

Это создает принципиальную трудность в случае, если ρ становится слишком малым, так как тогда соответствующий симплекс обретает скорость, сравнимую с c . В этом случае наше определение симплексов теряет силу, так как наше определение предполагает, что летящие экземпляры появляются в ячейке тогда как симплекс стоит на месте; этот симплекс не может покинуть ячейку до того как экземпляр не будет им поглощен. Мы можем, однако, модифицировать наше определение, предполагая что экземпляр тонкого слоя может пролететь достаточно большое расстояние, прежде чем будет поглощен каким-то симплексом. Заметим, что эта трудность та же

что и в квантовой гидродинамике Бома; вряд ли возможно преодолеть ее в рамках роевого подхода вообще.

С другой стороны, область, где $\rho = 0$ играет важную роль в симуляции квантовой динамики; ее влияние проявляется непосредственно в силу высокой скорости тонкого слоя. В квантовом рое, не зависимо от того, как он рассматривается (гидродинамически или в рамках динамической диффузии), невозможно сделать рассмотрение локальным, так как это всегда можно сделать в классической гидродинамике, где мы отделяем "малый кубик" и рассматриваем поток через его границу. Причина состоит в наличии газообразной фракции – тонкого слоя. В дальнейшем мы введем количественную характеристику этой формы квантовой нелокальности.

Мы выберем начальное состояние роя в такой форме, где в каждой ячейке, где вообще есть экземпляры роя, находится ровно один симплекс. Плотность роя $\rho(\vec{r})$ будет тогда пропорциональна порядку этого симплекса.

Определенная нами эволюция зависит от константы a , которая представляет интенсивность уничтожения связей; мы можем считать, что она равна $1/\Delta T$ где ΔT время жизни связи. Процесс уничтожения связей будет тогда пуассоновским случайным процессом с данной интенсивностью.

Рассмотрим две соседние ячейки с центрами x и x_1 и с общей границей, плотность потока через эту границу p_{x,x_1} , и найдем ее вариацию во времени. Плотность потока равна потоку, деленному на площадь δx^2 границы (поток через границу единичного куба – мы берем ее для перехода от количества экземпляров к плотности), мы назовем просто потоком. Почему мы занимаемся именно вариацией потока, а не потоком как таковым? Потому что сам поток зависит от начального состояния роя, который должен быть нам заранее задан: мы не можем вывести его из механизма ускорения экземпляров. Механизм динамической диффузии, который мы определили, влияет на поток только через его вариацию во времени, которая и есть динамическая характеристика, подобная силе. Мы увидим, что в начальный момент поток создается движением симплексов, тогда как свободные экземпляры из тонкого слоя создают вариацию потока.

Пусть j и j_1 – порядки симплексов в ячейках x и x_1 соответственно. Мы оценим вклад в вариацию потока от газа и жидкости отдельно.

1). **Жидкая фракция – инерция.** Мы оценим вклад первого слагаемого. Функция плотности $\rho(t)$ обычно имеет очень негладкий характер, когда "пики" чередуются с "дырами". В этом состоит влияние фиксации δx ; далее мы увидим, что такая фиксация неизбежна. Для того, чтобы справиться с этим прерывным характером, мы слегка изменим первый пункт, и разрешим экземплярам лететь при уничтожении связей, как во втором пункте. Тогда некоторая порция из $a_l j$ экземпляров полетит в направлении \vec{l} , где $a_l = a_0 \vec{l} \cdot v(r)$, так что a_0 есть малая константа, $a_0 \ll a$. Этот путь сглаживания плотности, однако, противоречит требованию инвариантности относительно замены системы отсчета на другую инерциальную: наш механизм не должен зависеть от такой замены. Мы заключаем это соглашение временно, для того, чтобы оценить вклад жидкой фракции в изменение потока. Эта замена будет законной при нерелятивистском предположении о движении роя, который состоит в том, что скорость симплексов гораздо меньше скорости экземпляров тонкого слоя. Таким образом, этот вклад составит $v_{norm}(r) \nabla \rho(r)$, где v_{norm} есть компонента скорости симплексов, ортогональная к границе, поскольку этот вклад создается разницей в порядках симплексов, находящихся по разные стороны от этой границы.

2) **Жидкая фракция – внешний потенциал.** Этот вклад составляет $b\rho\nabla V$.

3) Газообразная фракция. Вклад взрыва пиков в изменение потока пропорционален разности числа экземпляров, летящих от x к x_1 и числа экземпляров, летящих в противоположном направлении. Таким образом, вклад газообразной фракции равен $a\nabla\rho$.

Мы можем сделать такой вывод. Если константы a и b существенно больше чем a_0 , изменение потока в единицу времени подчиняется уравнению

$$\frac{dp_{x,x_1}}{dt} = a\nabla\rho + b\rho\nabla V. \quad (4)$$

Это уравнение характеризует динамическую диффузию. Для того, чтобы показать, что этот механизм может служить приближением квантовой унитарной динамики, мы должны теперь вывести его из уравнения Шредингера.

2.2. Сведение уравнения Шредингера к рою

Мы рассмотрим такой рой, что равенство (2) справедливо всегда, где Ψ есть точное решение уравнения Шредингера, и выведем оценку для изменения потока непосредственно из уравнения Шредингера, принимая некоторые особенности движения экземпляров, которые согласуются с механизмом динамической диффузии. Наша цель в том, чтобы показать, что скорость изменения потока удовлетворяет (4).

Чтобы удовлетворить основному требованию (2), мы должны определить плотность роя как

$$\rho(r) = \frac{N_d}{dx^3 N_{total}}, \quad (5)$$

где N_d есть число экземпляров, находящихся в кубике со стороной dx с центром r , N_{total} есть общее число экземпляров в рою. Чтобы сравнить вариацию потока динамического роя с вариацией потока точного решения уравнения Шредингера, мы должны устремить в этом определении $\delta x \rightarrow 0$, что означало бы, что мы рассматриваем не один рой, а последовательность роев с плотностями ρ_n при увеличении n . Мы не будем явно выписывать последовательность роев, чтобы избежать ненужного усложнения, вместо этого мы условимся в каждый момент можно продолжить наше подразделение пространства на кубики меньшего размера так, чтобы δx уменьшалось в разумных пределах. В этом смысле мы пишем $\rho(x) = |\Psi(x)|^2$, что означает

$$\rho_n(x) \rightarrow |\Psi(x)|^2 \quad (n \rightarrow \infty), \quad (6)$$

без специального упоминания. Такая последовательность роев, реализующая приближения плотности волновой функции – решения уравнения Шредингера мы назовем допустимым приближением квантовой унитарной эволюции. Теперь мы зафиксируем зерно δx -ного разрешения. Эта фиксация необходима для вычисления вариации потока. Мы назовем поток с фиксированным δx детальным потоком, чтобы подчеркнуть его зависимость от δx .

Сначала мы покажем, что существует квантовый рой с локальным перемещением экземпляров, то есть равенство (2) можно обеспечить, перемещая экземпляры только на малые дистанции: между соседними ячейками.

Мы можем очень просто обеспечить выполнение (2), если не будем накладывать никаких ограничений на скорости экземпляров и их изменение. То есть экземпляры могут перемещаться на одном шаге на любое расстояние и равенство (2) будет справедливым на каждом шаге с требуемой точностью; оно будет сохраняться на протяжении некоторого временного интервала δt . Такой механизм, однако, будет бесполезным, поскольку он зависит от априорного знания волновой функции, тогда как наша цель – обойтись без волновой функции вообще.

Мы займемся квантовым роем, и начнем с уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(r, t) + V_{pot}(r, t) \Psi(r, t), \quad (7)$$

которое можно переписать как

$$\Psi_t^r(r) = -\frac{\hbar}{2m} \Delta \Psi_t^i(r) + \frac{V_{pot}}{\hbar} \Psi_t^i(r), \quad \Psi_t^i(r) = \frac{\hbar}{2m} \Delta \Psi_t^r(r) - \frac{V_{pot}}{\hbar} \Psi_t^r(r) \quad (8)$$

для вещественной и мнимой частей Ψ^r , Ψ^i волновой функции $\Psi = \Psi^r + i\Psi^i$. Мы интересуемся эволюцией плотности, то есть функцией

$$\rho(r, t) = (\Psi^r(r, t))^2 + (\Psi^i(r, t))^2.$$

Для зафиксированного нами значения δx мы применим приближенную схему для второй производной

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} \approx \frac{\Psi(x + \delta x) + \Psi(x - \delta x) - 2\Psi(x)}{(\delta x)^2} \quad (9)$$

для произвольного момента времени, считая, что волновая функция обладает всеми условиями для такой аппроксимации. Поскольку прибавление произвольной константы к потенциалу V_{pot} не влияет на квантовую эволюцию плотности, мы можем рассматривать вместо V_{pot} другой, эквивалентный потенциал $V_{pot} + \alpha$, где $\alpha = -\frac{3\hbar^2}{m(\delta x)^2}$, что приведет к исчезновению слагаемого $2\Psi(x)$ в разностных схемах для вторых производных по x, y, z (из-за этого появляется коэффициент 3) после их подстановки в уравнение Шредингера.¹ Для упрощения записи мы введем коэффициент

$$\gamma = \frac{\hbar}{2m} \frac{1}{(\delta x)^2}.$$

Поскольку мы пока не знаем механизм движения экземпляров в рою, мы будем просто перемещать их между ячейками и некоторым резервом, который не участвует в вычислении волновой функции. Разобьем эволюцию квантового роя на малые промежутки длительности δt , так что на каждом промежутке экземпляры перемещаются в пределах этого резерва и двух соседних ячеек. Если мы докажем, что диффузионный механизм дает квантовую эволюцию на любом таком участке, это будет верно и для

¹Этот прием не строг с математической точки зрения; мы используем факт (возможность прибавления константы к потенциалу), который обосновывается анализом, в то время как мы фиксируем δx и в будущем не сможем устремить его к нулю, без замены всего роя. Однако, это не критично: мы могли бы сохранить последнее слагаемое и провести вычисления с ним; это бы дало тот же результат, но усложнило бы вычисления.

всей эволюции в достаточно большом временном отрезке, поскольку предположение об обмене в рамках ближайших ячеек никак не ограничивает общности. Мы также условимся, что эти ячейки отличаются друг от друга только сдвигом вдоль оси x , что также не нарушает общности. Обозначим их центры через x и $x_1 = x + \delta x$.

Теперь разобьем полученный отрезок Δt на две половинки: 1) и 2), условившись о следующем. На половине 1) мы будем рассматривать только изменение значения $\rho(x)$, которое зависит от $\rho(x_1)$, а на половине 2) – изменение значения $\rho(x_1)$, которое зависит от $\rho(x)$ (эффект от малого изменения $\rho(x)$ на первой половине имеет более высокий порядок и мы его игнорируем). Плотность однозначно определяется волновой функцией, потому мы будем рассматривать изменение волновой функции на каждой из половинок. Покажем, что требуемое изменение волновой функции можно получить так: на первой половине надо рассмотреть изменение Ψ согласно равенству

$$1) \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} \approx \frac{\Psi(x + \delta x) - 2\Psi(x) + \Psi(x - \delta x)}{(\delta x)^2}$$

а на второй половине – согласно равенству

$$2) \frac{\partial^2 \Psi(x_1)}{\partial x^2} \approx \frac{\Psi(x_1 - \delta x) - 2\Psi(x_1) + \Psi(x_1 + \delta x)}{(\delta x)^2}.$$

Действительно, если мы примем, что волновая функция меняется согласно этим двум равенствам для всех узловых точек, у нас выйдет, что результирующее ее изменение в результате описанного процесса над всеми возможными x совпадет с изменением согласно разностной схеме (9). Учитывая, что равенство 2) получается из равенства 1) заменой x на x_1 и наоборот, мы получим, что результат последовательного выполнения половинок 1) и 2) можно представить системой уравнений

$$\Psi_t^r(x) = -\gamma \Psi^i(x_1) + V(x) \Psi^i(x), \quad \Psi_t^i(x) = \gamma \Psi^r(x_1) - V(x) \Psi^r(x), \quad (10)$$

и аналогичной системой, которая получается из данной заменой x на x_1 и наоборот, где нижний индекс у волновой функции означает дифференцирование по t . Это означает, что мы рассматриваем только обмен экземплярами через фиксированную границу между ячейками x и x_1 . Если мы прибавим такой же обмен между x и $x_0 = x - \delta x$, взятый с обратным знаком, мы получим полное изменение плотности с точностью до эффекта разделения роя на две фракции (см. ниже). Этот обмен имеет аналогичный вид и все дальнейшие вычисления можно провести и для него, с аналогичным результатом; поэтому мы будем заниматься только обменом между x и x_1 .

Итак, система (10) пригодна для учета изменения волновой функции в точке x из-за обмена справа, а для изменения волновой функции в точке x_1 из-за обмена слева надо использовать аналогичную систему, где x заменено на x_1 и наоборот. Уравнение Шредингера получается как результат последовательности таких шагов, где x и x_1 могут располагаться шестью способами вдоль всех трех координатных осей. Под интервалом времени Δt мы теперь понимаем такой короткий интервал, в течение которого обмен идет только между x и x_1 (и, возможно, резервом экземпляров; мы скоро покажем, что резерв как таковой вообще не нужен).

Для такого интервала мы имеем

$$\begin{aligned}
p_{x,x_1} &= \frac{\partial \rho(x)}{\partial t} \Big|_{x,x_1} = 2\Psi^i(x)(\gamma\Psi^r(x_1) - V(x)\Psi^r(x)) + 2\Psi^r(x)(-\gamma\Psi^i(x_1) - V(x)\Psi^i(x)) = \\
&= 2\gamma(\Psi^i(x)\Psi^r(x_1) - \Psi^r(x)\Psi^i(x_1)) = -\frac{\partial \rho(x_1)}{\partial t} \Big|_{x,x_1}, \tag{11}
\end{aligned}$$

где через $\frac{\partial \rho(x)}{\partial t} \Big|_{x,x_1}$ мы обозначаем вклад в изменение плотности, появляющийся из-за движения экземпляров через границу, разделяющую кубики с центрами x и x_1 . Отсюда следует, что уменьшение числа экземпляров в одной ячейке совпадает с их увеличением в другой, то есть эволюция роя удовлетворяет свойству локальности и мы можем говорить о потоке экземпляров через элемент данной поверхности, если мы зафиксируем значение зерна δx .

2.3. Зависимость роевой динамики от зерна

Мы подошли к самому важному пункту с описании роевой квантовой динамики: ее зависимости от зерна δx . Мы не можем утверждать, что выражение (11) определяет число экземпляров, которые увеличивают плотность в соответствующей ячейке в результате пересечения рассматриваемой границы в единицу времени. Выражение для плотности детального потока (11) не является выражением для плотности обычного потока классических частиц через поверхность. Причина в том, что эта плотность критически зависит от значения δx , так что ее невозможно устремить к нулю. Мы не можем применять к динамическому рою обычный рецепт математического анализа, состоящий в том, что можно неограниченно делить интервалы (x, x_1) и переходить к пределу при $\delta x \rightarrow 0$ так что все групповые величины (плотность и скорость) сохраняют свои значения (и даже их уточняют). Выражение (11) неявно свидетельствует о том, что в рое есть экземпляры с принципиально разными скоростями, так что мы не можем говорить о скорости всех экземпляров в данной точке. Обращаясь к динамическому диффузионному рою, определенному нами в предыдущем разделе, мы вспомним, что он разделен на две фракции: быстрая (отдельные экземпляры из тонкого слоя) и медленные (симплексы). Механизм движения экземпляров из тонкого слоя состоит в том, что они на каждом промежутке Δt отрываясь от своих материнских симплексов, прыгают на число ячеек, пропорциональное Δt , причем их число пропорционально порядку материнского симплекса. Механизм движения медленной части состоит в том, что симплексы ждут, стоя на месте, число шагов, пропорциональное $1/\Delta t$, и только потом смещаются на одну ячейку в направлении своей скорости. В этом случае мы не можем написать для вектора детального потока \bar{p} выражение

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = \frac{1}{N(\delta x)^3} \int_{S(r)} \bar{p}(r, t) \bar{n}(\bar{r}_1) ds(r_1) \tag{12}$$

которое справедливо для обычного потока p . Вместо этого мы должны использовать выражение

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = \frac{1}{N(\delta x)^3} \int_{S(r)} \bar{p}(r, t) \Big|_{(x,x_1)} \bar{n}(\bar{r}_1) ds(r_1) + \Lambda, \tag{13}$$

где слагаемое Λ имеет следующую природу.

Пусть δx и Δt зафиксированы. Чтобы написать выражение (12), необходимо гарантировать, что все экземпляры быстрой части роя, которые пересекли границу

между ячейками в направлении r , оставались бы в соответствующей ячейке, и не покидали ее из-за своей высокой скорости. Для этого надо сделать Δt достаточно малым. Но тогда экземпляры медленной части роя не смогут сдвинуться вообще! Для выявления движения как быстрых, так и медленных экземпляров, есть только один путь: уменьшить зерно δx . Но этого мы как раз и не можем сделать, так как это сразу увеличит интенсивность вылета быстрых экземпляров из материнских симплексов, то есть нам придется рассматривать уже другой рой.

Итак, невозможно заменить дискретный тип движения экземпляров быстрой и медленной частей роя непрерывным движением, как в случае классической среды. Слагаемое Λ имеет физический смысл вклада от фазового перехода между быстрой и медленной частями роя. Мы оказываемся перед необходимостью рассматривать отдельно две фракции: медленную жидкость и быстрый газ. (Иначе, если мы дадим возможность симплексам сдвигаться на каждом шаге, надо было бы дальние прыжки экземпляров тонкого слоя, когда оторвавшийся экземпляр, исчезнувший в начальной ячейке, сразу появляется в другой, которая может не иметь общей границы с первоначальной, что создаст не меньшие проблемы при компьютерном моделировании.) В квантовом рое нет обычного потока экземпляров и мы можем рассматривать только детальный поток.

Невозможность применения стандартных аналитических рецептов для квантового роя не означает невозможности строгого математического обоснования данного алгоритма средствами классической математики.² Я не исключаю возможность найти такое обоснование, но только для случая одной реальной частицы. Невозможно получить такого обоснования в общем виде, для многих частиц, поскольку ограничение на число возможных экземпляров играет здесь основную роль и делает невозможным применение идеологии математического анализа вообще. В частности, это означает невозможность доказать строго, что наш механизм движения экземпляров дает во всех случаях наилучшее приближение точного решения уравнения Шредингера. То обоснование, которое приведено ниже, должно рассматриваться как объяснение работы алгоритма, но не как строгое доказательство его пригодности во всех случаях. Общая идеология конструктивизма (см. книгу [2]) предлагает нам одно: полагаться на прямое компьютерное моделирование.

2.4. Сведение уравнения Шредингера к динамической диффузии

Мы введем такие величины, зависящие от δx :

$$I = \frac{h^2}{2m^2(\delta x)^3}, \quad \kappa = \frac{h}{m \delta x} \quad (14)$$

где h постоянная Планка. Параметр I называется интенсивностью действия градиента плотности, κ интенсивность потенциала.

Теперь мы можем найти изменение во времени детального потока $\frac{\partial}{\partial t} p|_{(x,x_1)} \bar{n} dS$ квантового роя через поверхность малого куба, нормаль к которой параллельна оси OX . Для этого надо продифференцировать выражение (11) по времени:

²В случае дельта функции Дирака классическое математическое обоснование было найдено И.Гельфандом в терминах линейных функционалов.

$$\begin{aligned}
(p_{x,x_1})'_t &= 2\gamma[(\gamma\Psi^r(x_1) - V(x)\Psi^r(x))\Psi^r(x_1) + \Psi^i(x)(-\gamma\Psi^i(x) + V(x_1)\Psi^i(x_1)) - \\
&\quad - (-\gamma\Psi^i(x_1) + V(x)\Psi^i(x))\Psi^i(x_1) - \Psi^r(x)(\gamma\Psi^r(x) - V(x_1)\Psi^r(x_1))] = \\
&= 2\gamma^2(\Psi^r(x_1))^2 - 2\gamma V(x)\Psi^r(x)\Psi^r(x_1) - 2\gamma^2(\Psi^i(x))^2 + \\
&\quad + 2\gamma V(x_1)\Psi^i(x)\Psi^i(x_1) + 2\gamma^2(\Psi^i(x_1))^2 - 2\gamma V(x)\Psi^i(x)\Psi^i(x_1) - \\
&\quad - 2\gamma^2(\Psi^r(x))^2 + 2\gamma V(x_1)\Psi^r(x)\Psi^r(x_1) = \\
&= 2\gamma^2((\Psi^r(x_1))^2 + (\Psi^i(x_1))^2 - ((\Psi^r(x))^2 + (\Psi^i(x))^2)) + \\
&\quad + 2\gamma[(V(x_1) - V(x))((\Psi^r(x))^2 + (\Psi^i(x))^2) + o(\delta x)], \tag{15}
\end{aligned}$$

где $o(\delta x) = (\Psi^r(x)\Psi^r(x_1) + \Psi^i(x)\Psi^i(x_1) - ((\Psi^r(x))^2 + (\Psi^i(x))^2))(V(x_1) - V(x))$; мы считаем внешний потенциал гладким.

Мы таким образом можем написать для детального потока формулу

$$\Delta p|_{(x,x_1)} = (-I\nabla\rho - \kappa\rho\nabla V)\Delta t. \tag{16}$$

Мы видим, что уравнение Шредингера дает то же изменение детального потока со временем, что и динамический диффузионный рой (см. равенство (4)), если мы положим $a = -I$, $b = -\kappa$.

2.5. Восстановление волновой функции по динамическому диффузионному рою

Для нахождения соответствия между стандартным описанием квантового состояния через его волновую функцию Ψ и роевое представление, мы примем, что последнее описывается парой функций

$$\rho(t, \bar{r}), \quad \bar{p}(t, \bar{r}), \tag{17}$$

где скалярная функция ρ есть плотность экземпляров а векторная функция $\bar{p}(r)$ есть вектор импульса роя, то есть сумма скоростей экземпляров, оказавшихся в малой ячейке со стороной δx и центром в точке r . Импульс роя не включает массу реальной частицы; $p(r)$ является роевой характеристикой, в которой роль "массы" играет общее число экземпляров.

Такая пара не опирается на концепцию комплексного числа, и не дает красивых дифференциальных уравнений шредингеровского типа для ρ и \bar{p} . Более того, механизм динамической диффузии, который мы ввели для имитации квантовой эволюции, существенно отличается от классических процессов (например, теплопереноса или колебаний) тем, что его интенсивность зависит от зерна пространственного разрешения. Мы пошли на это ради основной цели: экономии вычислительных ресурсов, что не просто необходимо для моделирования квантовой динамики сложных систем, но абсолютно неизбежно в дальнейшем ее исследовании.

Мы покажем, как по заданному состоянию (17) роя можно построить обыкновенную комплексную волновую функцию Ψ . Мы предположим, что носитель волновой функции связан, то есть любые две его точки можно соединить кривой, не пересекающей область нулевой плотности $\rho = 0$. Это ограничение такое же, как и в известном методе Монте Карло для нахождения возбужденных стационарных состояний. С этой целью мы рассмотрим равенство (11), и подставим в него выражение для волновой функции через плотность: $\Psi(r) = \sqrt{\rho(r)} \exp(i\phi(r))$. Цель состоит в вычислении фазы $\phi(r)$ волновой функции. Мы отметим, что физический смысл имеет

лишь относительная фаза между разными точками, и мы можем фиксировать некоторую точку r и рассмотреть фазу в другой точке r_1 относительно r . Если r_1 близка к r , равенство (11) даст нам

$$\phi(r) - \phi(r_1) = \arcsin k(\delta x)^2 \frac{\bar{p}(\bar{r} - \bar{r}_1)}{\sqrt{\rho(r)\rho(r_1)}}$$

что приводит к такой формуле для относительной фазы:

$$\phi(r_1) = \int_{\gamma} k(\delta x)^2 \bar{v} d\bar{\gamma} \quad (18)$$

где путь γ идет от r к r_1 . Это равенство явно зависит от выбора пути γ , значит, мы должны доказать его корректность, то есть фактическую независимость от этого выбора.

Заметим, что этот вывод будет корректен только в случае, если $\rho > e > 0$ для некоторой константы $e > 0$, то есть плотность должна быть отделена от нуля на всей области рассмотрения. Поскольку фаза определена только с точностью до целого кратного 2π , различные выборы пути могут привести, самое большее, к добавке к фазе такого вида, что имеет место, например, для возбужденного состояния электрона в атоме водорода с ненулевым магнитным моментом. Мы покажем, что интеграция импульса \bar{p} роя вдоль замкнутого пути сохраняет свое значение во времени тем точнее, чем меньше зерно δx . Из этого будет следовать, что если в начальный момент времени определение (18) корректно, то оно сохраняет свою корректность и для последующих моментов.

Мы посчитаем производную интеграла от импульса роя вдоль замкнутого контура γ_c . Применяя формулу (16) и учитывая, что $\partial \bar{p} / \partial t$ пропорционально $\rho \partial \bar{v} / \partial t$, мы получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\gamma_c} \bar{v} d\gamma = - \int_{\gamma_c} A I(\delta x)^2 \frac{\nabla \rho}{\rho} + B \kappa(\delta x)^2 \nabla V \quad (19)$$

для некоторых A, B . Первое слагаемое дает нуль после интеграции вдоль замкнутого пути, так как это есть $\nabla \ln \rho$, второе слагаемое дает нуль по аналогичной причине.

Теперь остается проверить корректность определения (18) в начальный момент, что может быть сделано непосредственно для каждого отдельного случая.

В случае, если волновая функция начального состояния может быть получена из основного состояния электрона в атоме водорода, где $\bar{v} = 0$, корректность вытекает из уже доказанного, так как здесь не будет фазового сдвига на $2\pi k$. Фаза любого основного состояния не зависит от точки. Если же для нахождения начального состояния рассматриваемой системы мы должны стартовать с какого-либо возбужденного состояния, мы должны сначала доказать корректность для такого состояния.

Теперь мы можем написать формулы, связывающие рыевые параметры с волновой функцией:

$$|\Psi(r)| = \sqrt{\rho(r)}; \quad \phi(r) = \int_{\gamma: r_0 \rightarrow r} k \bar{v} \cdot d\gamma, \quad \bar{v} = b \nabla \phi(r), \quad (20)$$

для некоторых a, b . Эти формулы позволяют перейти от волновой функции к рою и обратно. Это описание имеет две особенности. Во-первых, за шредингеровской ди-

намикой на уровне зерна δx по пространству и δt по времени стоит роевая динамика на уровне меньших зерен Δx , Δt , так что есть существенная зависимость роевых параметров (интенсивности распада связей) от зерна Δx . Во-вторых, квантовая динамика предполагает наличие, наряду с обычными симплексами, составляющими основную массу плотности, еще и так называемого тонкого слоя одиноких быстрых экземпляров.

В формулах (20) средняя скорость \bar{v} роя примерно равна средней скорости симплексов в любой точке, где плотность не слишком мала. В этих точках тонкий слой не дает существенного вклада в импульс роя, но дает основной вклад в изменение импульса. Если же мы применим внешний потенциал V_{pot} , он даст вклад в импульс роя, так как его влияние будет распространяться на симплексы.

3. Случай многих частиц

Мы покажем, что метод коллективного поведения можно обобщить на случай многих частиц. Пусть у нас есть квантовый ансамбль из n частиц, которые мы будем нумеровать натуральными числами: $1, 2, \dots, n$. Мы можем написать для этой системы уравнение Шредингера, которое даст ее унитарную эволюцию. Но из экспериментов нам хорошо известно, что реальные эволюции весьма сильно отличаются от унитарных. Это отличие нельзя относить целиком на счет эффекта открытости квантовой системы. Гипотеза "открытых систем" хороша только для простых систем, в которых нас не интересует динамика сложных квантовых состояний, и мы не собираемся анализировать коллапс волновой функции при ее измерении. "Открытые системы" есть гипотеза копенгагенской квантовой теории, и она совершенно не подходит для изучения физики квантового компьютера.

Нам нужна модель декогерентности, которая не апеллирует к "открытым квантовым системам", то есть нам нужна встроенная модель декогерентности. Эта модель может базироваться только на ограниченности вычислительных ресурсов классического компьютера. Такая модель последовательно обоснована в книге [2]; мы называем ее абсолютной, в силу того, что она характеризует саму систему, а не ее окружение. На языке волновых функций такая модель состоит в том, что декогерентность представляет собой редукцию квантового состояния

$$|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j\rangle \quad (21)$$

в момент, когда память моделирующего компьютера не может вместить полную запись данного состояния. Как показано в [3], такая модель дает правило Борна для вычисления вероятностей исходов измерения квантового состояния, что показывает ее корректность. Однако, такая форма абсолютной модели декогерентности еще не может служить в качестве эвристики для моделирующего алгоритма в случае многих частиц. Здесь нам пришлось бы целиком полагаться на вычисления с рамках матричной алгебры, а этот путь с самого начала очень ресурсоемок (см. подробные обоснования в [2]).

Мы рассмотрим роевое представление нашей системы n частиц $1, 2, \dots, n$, и пусть S_1, S_2, \dots, S_n обозначают их индивидуальные рои, соответствующие состояниям $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \dots, |\Psi_n\rangle$. Если рассмотреть ансамбль, состоящий из всех этих экземпляров, он будет представлять простое незапутанное состояние вида $|\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\Psi_n\rangle$. Но для представления запутанных состояний вида

$$|\Phi\rangle = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} \lambda_{j_1, j_2, \dots, j_n} |j_1, j_2, \dots, j_n\rangle \quad (22)$$

нам нужно ввести новый существенный элемент в роевой подход. Это – связи между экземплярами из различных роев, которые мы будем называть собственными, в отличие от несобственных связей, введенных нами ранее для скрепления экземпляров в симплексы. Базисное состояние j_i можно трактовать как координаты частицы i в соответствующем конфигурационном пространстве. Представление волновой функции в виде (22) означает, что существуют связи, соединяющие точки j_1, j_2, \dots, j_n в единый кортеж.

В методе коллективного поведения (см. [2]) мы считаем, что связи соединяют не пространственные точки, а экземпляры разных реальных частиц. Эти связи можно записать как кортежи вида

$$\bar{s} = (s_1, s_2, \dots, s_n) \quad (23)$$

где для любых $j = 1, 2, \dots, n$ $s_j \in S_j$. Волновая функция $|\Phi\rangle$ тогда будет представлена как множество \bar{S} кортежей \bar{s} так что для любого $j = 1, 2, \dots, n$ и $s_j \in S_j$ один кортеж вида (23) – представитель так называемого квантового мира – в многомировой интерпретации Эверетта квантовой теории. Мы рассматриваем кортеж (23) как экземпляр системы n частиц. В случае одной квантовой частицы мы видели, что действие градиента плотности на тонкий слой может служить моделью квантовой динамики. Этот процесс можно непосредственно обобщить на случай n частиц. Мы назовем \bar{S} роевым представлением системы n частиц.

Плотность роя \bar{S} определяется как

$$\rho_{\bar{S}}(r_1, r_2, \dots, r_n) = \lim_{dx \rightarrow \infty} \frac{N_{r_1, r_2, \dots, r_n, dx}}{N(dx)^{3n}}, \quad (24)$$

где $N_{r_1, r_2, \dots, r_n, dx}$ есть общее число кортежей, находящихся в $3n$ -мерном кубе со стороной dx и центром r_1, r_2, \dots, r_n , N – общее число всех кортежей.

Если волновая функция $|\Phi\rangle$ является тензорным произведением одно-частичных волновых функций:

$$|\Phi\rangle = \bigotimes_{i=1}^n |\phi_i\rangle$$

соответствующие связи тогда получаются случайным выбором экземпляров из равномерного распределения $s_j \in S_j$ для всех $j = 1, 2, \dots, n$, которые, таким образом, формируют каждый кортеж s_1, s_2, \dots, s_n . При таком выборе кортежей мы получим плотность соответствующего роя, удовлетворяющую условию Борна, которое для роев можно записать в виде

$$\sum_{\bar{r} \in D} |\langle \bar{r} | \Phi \rangle|^2 = \frac{N_{\bar{r}, \bar{S}}}{N} \quad (25)$$

где $D \subset R^{3n}$, $N_{\bar{r}, \bar{S}}$ есть общее число кортежей, находящихся в области D . Но для запутанных состояний $|\Phi\rangle$ такой выбор кортежей для набора роев \bar{S} не даст нам условия (25). Таким образом, мы должны взять (25) за определение выбора кортежей в \bar{S} . Но для определения роя мы должны также определить и скорости всех экземпляров, а именно, обобщить равенство (20) на случай n реальных квантовых частиц.

Пусть $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n)$ есть волновая функция системы n частиц, $\Psi = |\Psi| \exp(i\phi(r_1, r_2, \dots, r_n))$ ее эйлеровское разложение. Через $\nabla_j \phi(r_1, r_2, \dots, r_n)$ мы

обозначаем градиент Ψ , взятый в координатах частицы j , где $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ есть фиксированный номер. Обобщение формул (20) на n частиц выглядит так:

$$|\Psi(\bar{r})| = \sqrt{\rho(\bar{r})}; \quad \phi(r) = \int_{\bar{\gamma}: \bar{r}_0 \rightarrow \bar{r}} k\bar{v} \cdot d\gamma, \quad \bar{v} = a\bar{\nabla}\phi(\bar{r}), \quad (26)$$

где \bar{r} обозначает r_1, r_2, \dots, r_n , $\bar{\nabla}$ обозначает $(\nabla_1, \nabla_2, \dots, \nabla_n)$, и $\bar{\gamma}$ есть путь в $3n$ -мерном пространстве. (26) является правилом, по которому можно определить рой для заданной волновой функции, если мы согласимся объединять экземпляры в кортежи не зависимо от их скоростей. При переходе от случая одной частицы к случаю многих частиц необходимо всюду вместо экземпляров одной частицы вставлять экземпляры всей системы (кортежи) из n частиц.

Описание механизма изменения скоростей будет прямым обобщением случая одной частицы. Градиент $\bar{\nabla}\rho$ плотности роя будет причиной изменения скоростей каждого экземпляра отдельной частицы в тех кортежах, которые принадлежат тонкому слою. Связь будет теперь иметь вид кортежа связей между парами экземпляров отдельных частиц, и будет создаваться или разрушаться, как единое целое. Динамическое сглаживание картины при моделировании также будет выглядеть, как прямое обобщение одночастичного случая.

Рассмотрим рой экземпляров квантовой системы n частиц. Каждый экземпляр представляет собой эвереттовский мир, и выглядит как $\bar{s} = (s_1, s_2, \dots, s_n)$. Как данный кортеж получает добавку к скоростям $\Delta\bar{p}_{\bar{s}} = (\Delta p_1, \Delta p_2, \dots, \Delta p_n)$? Для этого он должен принадлежать тонкому слою, то есть быть результатом распада кортежа связей на предыдущем шаге. Рассмотрим все другие кортежи, лежащие в непосредственной окрестности \bar{s} в смысле метрики n частичного конфигурационного пространства, и найдем градиент их плотности, который выглядит так:

$$\bar{\nabla}\bar{\rho} = (\nabla_1, \nabla_2, \dots, \nabla_n). \quad (27)$$

Теперь каждый экземпляр s_j получает прибавку к своему импульсу в виде $-I\nabla_j$. Список элементов (27) не определяется плотностями отдельных частиц. Он определяется плотностью роя всей системы n частиц. То есть, влияние на ∇_j оказывает не плотность роя j -й частицы, взятой в отдельности, но экземпляры всех частиц, соединенные в один кортеж с окружением этой частицы, при условии, что такие кортежи расположены близко к \bar{s} . Мы могли бы рассматривать плотности отдельных частиц только в случае незапутанного состояния. Таким образом, если мы хотим исследовать общий случай запутанных состояний в роевом представлении, мы должны ввести в рассмотрение связи между экземплярами отдельных частиц.

Пусть m есть число экземпляров каждой отдельной частицы. Тогда, ввиду нашего условия о непересечении кортежей, мы будем иметь ровно m различных кортежей, которые попарно не пересекаются ни по одному члену. Если мы теперь устремим число реальных частиц n к бесконечности, оставив m неизменным, мы получим увеличивающееся отклонение нашей модели от точного решения уравнения Шредингера для рассматриваемого ансамбля. Таким образом, фиксация m означает присутствие внутреннего фактора декогерентности, не зависящего ни от какого "окружения". Сложность модели будет расти линейно с ростом n , вместо экспоненты, как при стандартном формализме. Поэтому декогерентность в этой модели будет нарастать экспоненциально с ростом числа реальных частиц, что полностью соответствует всем

экспериментам с запутанными квантовыми состояниями. То есть, метод коллективного поведения реализует абсолютную модель декогерентности, которая происходит из-за ограниченности классической памяти моделирующего алгоритма.

4. Роль коллективного поведения в моделях молекул и наноструктур

Эвристика коллективного поведения играет большую роль в моделировании структур, свойства которых лежат на границе классического и квантового описания. Моделирование таких структур связано с проектом масштабируемого квантового компьютера ([5]). Почему такое моделирование невозможно провести, опираясь только на традиционный "кубитовый" формализм квантовой информатики, или теорию открытых систем (см. [7])? Потому что сущность декогерентности состоит в коллапсе волновой функции, и сам момент коллапса не может быть описан в рамках стандартного формализма. При приближении к точке коллапса обязательно возникают запутанные состояния микрообъектов, считающихся "чисто квантовыми", как, например, возбужденные состояния атомов, с объектами, которые считаются классическими, например, поле лазерного импульса (в ловушках Пауля для холодных ионов см. [6]), или положение мезоскопической мембраны резонатора. Для моделирования таких процессов требуется язык, одинаково хорошо работающий как с классическим, так и с квантовым описанием объектов. Именно таков язык коллективного поведения.

Этот язык обладает необходимой гибкостью как для описания больших регулярных ансамблей, типа кристаллических решеток в твердых телах, так и для описания отдельных молекул и их взаимодействий. Также здесь возможны переходы от атомного уровня описания как к средам (метод представителей), так и к субатомному уровню (прыжки электронов, спинтроника, фотоны) с полным сохранением свойств запутанных состояний сложных систем.

5. Заключение

Метод коллективного поведения позволяет адекватно представить отклонение от унитарной эволюции сложных систем, когда мы рассматриваем их на квантовом уровне. Такие системы не обязательно принадлежат к микромиру, но сложность их поведения всегда зависит от уровня их описания. Коллективное поведение дает общую эвристику для такого моделирования, но с его помощью нельзя непосредственно получить "численные" результаты, столь ценимые в физике эпохи до квантового компьютера. Сложность поведения систем можно трактовать как невозможность их описания системами дифференциальных уравнений; такие системы требуют подхода, который можно назвать физическим конструктивизмом. Главным критерием в конструктивизме является возможность построения видеофильма, реалистически отображающего реальный процесс в соответствующей временной и пространственной шкале. Типичным примером сложных систем являются биополимеры – белки и нуклеиновые кислоты. Построение алгоритмов для конкретных систем является здесь предметом специальной работы программистов.

Литература

1. *S. Esposito*. Photon wave mechanics: a de Broglie-Bohm approach // *Found. Phys. Lett.*, 1999,12, 167.
2. *Ю. И. Ожигов*. Конструктивная физика // РХД, Москва-Ижевск, 2010, 424 стр.
3. *Y.Ozhigov*. Amplitude quanta in multi particle system simulation // *Russian Microelectronics*, 2006, vol. **35**, 1, 53-65.
4. *A.Ozhigov, K.Arakelov, Y.Ozhigov*. Principles of the numerical simulation of many body quantum dynamics // *Quantum computers and computing*, 2006, vol. **6** N1, 137-148.
5. *Валиев К.А.* Квантовые компьютеры: смена парадигмы вычислений // *Вестн. МГУ, сер. 15: Выч. мат. и киберн.*, 2005, N.2,3-16.
6. *Marek Sasura, Vladimir Buzek*. Cold Trapped Ions as Quantum Information Processors // *Journal of Modern Optics*, 2002, 49, 1593-1647.
7. *Breuer H.P., Petruccione F*. The theory of open quantum systems // *Oxford Univ. Press*, 2002, 576 pp.

PRESENTATION OF DECOHERENCE IN COMPUTER SIMULATION OF QUANTUM STATES FOR NANOSYSTEMS

Yu.I. Ozhigov

The Lomonosov Moscow State University

ozhigov@cs.msu.su

Received 22.11.2012

A method is offered for accounting the decoherence in modelling of the dynamics of nanoscale systems, based on a swarm representation of quantum states, or heuristics of the collective behavior. Such a quantum decoherence is not associated with the influence of external environment, as in the model of Caldera-Leggett, but with the limitation of computational resource. It is shown that in the limit of hard decoherence this model gives Born's probability distribution of observations, while the growth of number of real particles gives an exponential deviation from exact solutions of the Shroedinger equation.